

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

CARLOS AUGUSTO DE OLIVEIRA COSTA

INVESTIGAÇÕES DE DERIVAÇÃO FRACIONÁRIA EM SISTEMAS DINÂMICOS

CURITIBA

2021

CARLOS AUGUSTO DE OLIVEIRA COSTA

INVESTIGAÇÕES DE DERIVAÇÃO FRACIONÁRIA EM SISTEMAS DINÂMICOS

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física, Setor de Ciências Exatas, da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcus Werner Beims

CURITIBA

2021

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

C837i Costa, Carlos Augusto de Oliveira
Investigações de derivação fracionária em sistemas dinâmicos [recurso eletrônico] / Carlos Augusto de Oliveira Costa. – Curitiba, 2021.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, 2021.

Orientador: Marcus Werner Beims.

1. Sistemas hamiltonianos. I. Universidade Federal do Paraná. II. Beims, Marcus Werner. III. Título.

CDD: 515.39

Bibliotecária: Vanusa Maciel CRB- 9/1928

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **CARLOS AUGUSTO DE OLIVEIRA COSTA** intitulada: "**Investigações de derivação fracionária em sistemas dinâmicos**", sob orientação do Prof. Dr. MARCUS WERNER BEIMS, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 26 de Fevereiro de 2021.

Assinatura Eletrônica

01/03/2021 14:38:47.0

MARCUS WERNER BEIMS

Presidente da Banca Examinadora (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

28/02/2021 08:08:31.0

SERGIO ROBERTO LOPES

Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

04/03/2021 15:53:02.0

FERNANDO ALBUQUERQUE DE OLIVEIRA

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA)

Eu dedico este trabalho à minha mãe, Izaira, que lutou tanto para que eu pudesse chegar
tão longe no meu percurso acadêmico.

AGRADECIMENTOS

Eu agradeço à minha mãe, Izaira, por me apoiar na minha carreira acadêmica.

Ao meu orientador, Dr. Marcus Werner Beims, por me dar tamanha liberdade para explorar a área do Cálculo Fracionário.

Agradeço as minhas irmãs, Vanessa, Andressa, Beatriz e Karolina, por cada uma ser tão única e importante em minha vida.

Aos meus orientadores anteriores, Professores Doutores Fabio e Mateus, por contribuírem para o desenvolvimento das minhas habilidades de pesquisa.

Aos meus demais professores, os quais contribuíram com a minha formação e com conselhos valiosos durante o meu percurso.

Aos meus amigos, por se fazerem presentes na minha vida.

À UFPR pelo suporte institucional.

À CAPES, pelo suporte financeiro para esta pesquisa.

Enfim, a todos que passaram e passam pela minha vida, contribuindo com ela de forma significativa.

RESUMO

Em 1996, Fred Riewe estabeleceu os fundamentos das mecânicas lagrangeana e hamiltoniana com derivação fracionária, permitindo a possibilidade de investigações de dinâmicas dissipativas. Publicações diversas foram derivadas deste trabalho, partindo das mais variadas formas de definição de coordenadas generalizadas. As mesmas foram estudadas nesta dissertação, verificadas para aplicabilidade para uma única partícula sujeita a um potencial, e comparadas quanto à significância física. Visando uma aplicação, um sistema sob banho térmico dissipativo foi selecionado. Observou-se que o mesmo possui propriedades similares ao problema original sem dissipação. Avaliações estatísticas foram possíveis por conta da abordagem hamiltoniana utilizada. As médias da função de forçamento sobre as condições iniciais foram conservadas, e a estrutura da Equação de Langevin para o movimento do sistema principal se manteve. Esse estudo possibilita o exame de sistemas mais específicos, concentrando-se em potenciais variados.

Palavras-chave: Cálculo Fracionário; Sistemas Dinâmicos; Banho Térmico.

ABSTRACT

In 1996, Fred Riewe established foundations of lagrangean and hamiltonian mechanics with fractional derivatives, allowing investigations of dissipative dynamics. Distinct publications were derived from this work, starting from a diversity of definitions of generalized coordinates. Such definitions were studied in this master thesis, verified for applicability with a single particle subjected to a potential, and compared for physical meaningfulness. Searching for an application, a system under a termic bath was selected. It was observed that it has similar properties as the original problem without dissipation. Statistical evaluations were possible because of the Hamiltonian approach. Average of forcing function under initial conditions remains the same, and the structure of Langevin Equation of motion of the main system is maintained. This study turns possible exams of more specific systems, focusing a variety of potentials.

Keywords: Fractional Calculus, Dynamic Systems; Termic Bath.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	FUNDAMENTOS DE CÁLCULO FRACIONÁRIO	12
2.1	FUNÇÕES ESPECIAIS	12
2.1.1	Fatorial e função gama	12
2.1.2	Funções digama e beta	14
2.1.3	Funções exponenciais generalizadas	17
2.1.4	Função piso	19
2.2	INTEGRAL FRACIONÁRIA	20
2.3	DERIVAÇÃO FRACIONÁRIA	25
2.3.1	Derivada de Riemann-Liouville	25
2.3.1.1	Aplicações a funções de interesse	27
2.3.1.2	Lei de expoentes para derivação	28
2.3.1.3	Combinação entre integração e derivação fracionária de Riemann-Liouville	30
2.3.1.4	Transformada de Laplace e condições iniciais	31
2.3.2	Derivada de Caputo	32
2.3.2.1	Relação com a derivação de Riemann-Liouville	34
2.3.2.2	Aplicações em funções de interesse	34
2.3.2.3	Transformada de Laplace e condições iniciais	37
2.3.2.4	Integração por partes	38
3	DINÂMICAS LAGRANGEANA E HAMILTONIANA FRACIONÁRIAS	40
3.1	ABORDAGENS COM DERIVAÇÃO DE RIEMANN - LIOUVILLE	40
3.1.1	Abordagem de Riewe	41
3.1.2	Abordagem de Agrawal de 2002	43
3.1.3	Aplicação - equação de movimento com dissipação linear	45
3.2	ABORDAGEM COM DERIVAÇÃO DE RIEMANN - LIOUVILLE SE- QUENCIAL	46
3.2.1	Abordagem de Muslih e Baleanu	47
3.2.2	Aplicação da abordagem de Muslih e Baleanu	48
3.2.3	Crítica ao modelo de Muslih e Baleanu - integração por partes	49
3.3	ABORDAGEM COM DERIVAÇÃO DE CAPUTO	50
3.3.1	Abordagem de Agrawal de 2007	50
3.3.2	Aplicação do modelo de Agrawal de 2007	52
3.4	COORDENADAS GENERALIZADAS DE KLIMEK	53
3.5	COMPARAÇÃO ENTRE ABORDAGENS ESTUDADAS	56
4	DINÂMICA FRACIONÁRIA PARA UM BANHO TÉRMICO DISSI- PATIVO	58

4.1	INTRODUÇÃO	58
4.2	ESCOLHA DO MODELO	59
4.3	BANHO TÉRMICO DISSIPATIVO - CASO SOBREAMORTECIDO	61
4.3.1	Equações de movimento de $q_{0,v}$ e Q para o caso sobreamortecido	62
4.3.2	Função partição e mecânica estatística	65
4.3.3	Distribuição estatística de $q_{0,v}$ e $p_{1,v}$ no instante $t = 0$ e limite $b \rightarrow a^+$	67
4.3.4	Cálculo do valor esperado de H_B para $t = 0$	67
4.3.5	Evolução temporal estatística das quantidades $q_{0,v}(t)$ e $p_{1,v}(t)$ no limite local	68
4.3.6	Estudo da função de forçamento $F(t)$	69
4.4	BANHO TÉRMICO DISSIPATIVO - CASO SUBAMORTECIDO	71
	Considerações Finais	74
	 APÊNDICES	 76
	APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES DE CÁLCULO FRACIONÁRIO	77
A.1	Integral do tipo função beta envolvendo logaritmo	77
A.2	Integral e derivada fracionária de Riemann-Liouville de uma função do tipo potência com intervalo de derivação genérico	78
A.3	Lei de expoentes para integração fracionária	78
A.4	Fórmulas de integração por partes	79
A.5	Propriedades de funções especiais	81
	APÊNDICE B – CÁLCULO ESTATÍSTICO PARA AS VARIÁVEIS DO BANHO TÉRMICO	82
B.1	Função partição	82
B.2	Cálculo de $\langle q_{0,v} \rangle$	83
B.3	Cálculo de $\langle p_{1,v} \rangle$	85
B.4	Cálculo de $\langle q_{0,v}^2 \rangle$	85
B.5	Cálculo de $\langle p_{1,v}^2 \rangle$	86
B.6	Cálculo de $\langle F(t) \rangle$	87
B.7	Cálculo de $\langle F_1 \rangle$, $\langle F_2 \rangle$, $\langle F_3 \rangle$ e $\langle F_4 \rangle$	87
	REFERÊNCIAS	90

1 INTRODUÇÃO

O nome fracionário dado ao Cálculo Fracionário pode produzir algumas confusões por conta de os índices de integração ou derivação assumirem quaisquer números reais ou complexos. Esse nome vem das primeiras discussões dessa área, coincidindo com os primórdios do Cálculo Diferencial e Integral. Nesse âmbito, Leibniz costumava trocar cartas com alguns matemáticos de sua época, conversando sobre possíveis significados de algo como $d^{1/2}y$ (MILLER; ROSS, 1993). Lagrange foi o primeiro a desenvolver a lei de expoentes para operadores de derivação inteiros:

$$\frac{d^m}{dx^m} \frac{d^n}{dx^n} y = \frac{d^{m+n}}{dx^{m+n}} y, \quad (1.1)$$

algo generalizado mais tarde para índices fracionários, porém com restrições sobre $y(x)$ discutidas em momentos posteriores da história (MILLER; ROSS, 1993).

Lacroix descreveu a primeira forma de generalizar a derivação inteira de uma potência $y(x) = x^m$, para m inteiro (MILLER; ROSS, 1993). Fourier dá sua própria contribuição para derivação de ordem arbitrária pela expressão (MILLER; ROSS, 1993) utilizando seu método de transformação de funções. Ele definiu o núcleo como uma função cossenoidal com uma fase adicional dependo da ordem de integração ou diferenciação desejados. Liouville contribuiu com duas propostas (MILLER; ROSS, 1993), a primeira baseada em um operador com funções exponenciais (as quais aparecem em funções descritíveis por série de Fourier complexa), e a segunda baseada na definição da função gama (estudada no Capítulo 2).

Por meio do cálculo fracionário desenvolvido até essa época, Niels Abel, em 1823, resolveu o problema da tautócrona, usando em seu trabalho a definição de derivação de ordem $1/2$. Heaviside, por volta de 1892, produziu resultados com operadores fracionários em um problema de difusão, por meio de seu cálculo operacional (MILLER; ROSS, 1993), levando a mesmos resultados obtidos pelo método conhecido de séries de Fourier.

Bernhard Riemann contribuiu com a área postumamente. Ele foi o primeiro a formular uma definição matemática para a integração fracionária, porém sempre adiou a publicação da mesma. Ela apareceu na revista *Gesammelte Werke*, em 1892, com o acréscimo de uma função auxiliar com a mesma função que as constantes de integração em integrais definidas, posteriormente criticada e eliminada por pesquisadores posteriores. Nessa alteração, o nome de Liouville foi acrescentado ao nome dessa definição por conta de perceber-se que suas propostas de integração eram abarcadas pela operação de Riemann.

Depois de muito tempo com discussões pontuais sobre algumas aplicações e limites de validade, o Cálculo Fracionário ganhou destaque na segunda metade do século XX

por conta de três conferências internacionais, a primeira em 1974, na Universidade de New Haven, Connecticut, EUA, a segunda em 1984, na Universidade de Strathclyde, Glasgow, Escócia, e a última 1989, na Universidade Nihon, localizada em Tóquio, no Japão (MILLER; ROSS, 1993). Nesses eventos, e em função deles, trabalhos foram publicados nas mais diversas áreas da Ciência e Engenharia. Com isso, consolidaram-se estudos sobre equações diferenciais fracionárias, lineares ou não-lineares, e seus métodos de resolução, o que propiciou uma aplicabilidade mais ampla para problemas físicos.

Desde então, o Cálculo Fracionário teve aplicação nas mais diversas áreas da Física. Para citar alguns exemplos, na Teoria Eletromagnética, foram realizadas investigações sobre soluções de ordem fracionária da equação de Helmholtz (ENGHETA, 1996), multipolos fracionários (ENGHETA, 1997), definição de um operador rotacional fracionário (ENGHETA, 1998).

As definições de derivação e integração fracionárias também aparecem em Termodinâmica e Dinâmica Não-Linear através de difusão anômala, resultando em diversas generalizações de equações de Fokker-Planck fracionárias para diversos estudos de caso (ZASLAVSKY, 2002).

Na Mecânica Quântica, partindo do conceito de caminhada aleatória de Lévy e integrais de caminho de Feynmann, Nick Laskin (2018) obtém uma versão fracionária da equação de Schrödinger, discutindo operadores, espaços de posição e momento e propagadores para diversos exemplos de potencial, como em problemas de partícula livre e oscilador harmônico. Em sua lista de referências, diversas publicações em seu nome e na área podem ser encontrados.

Na área da mecânica hamiltoniana, Fred Riewe (1996) foi o primeiro autor a considerar a aplicação do cálculo fracionário em problemas com lagrangeana (L) e hamiltoniana (H), chegando à conclusão de que, em sistemas autônomos, não se obtém H como uma constante de movimento, abrindo a possibilidade de estudos de hamiltonianas com dissipação. Anteriormente, isso era apenas possível por meio de funções auxiliares no formalismo lagrangeano, sem correspondência para H (GOLDSTEIN; POOLE; SAFKO, 2002). Diversos trabalhos derivados de Riewe (1996) elaboram modelos com diversas definições de derivadas de coordenadas generalizadas com definições distintas de derivação fracionária, assim como suas generalizações, e obtendo as mais variadas equações de Euler-Lagrange e equações canônicas de movimento.

O objetivo desta dissertação foi estudar e analisar as mecânicas lagrangeana e hamiltoniana de Riewe e de seus trabalhos derivados, incluindo os tipos mais simples de operadores de derivação fracionária por conta da ampla generalização desses operadores multiplicarem publicações na área. Problemas mais simples contendo energia cinética proporcional a um termo quadrático de velocidade e potencial dependente de posição foram considerados, com uma adição de um potencial cuja consequência é o acréscimo

da dissipação nas equações de movimento. Limites de validade são considerados por comparação ao desenvolvimento matemático do Cálculo Fracionário. Buscou-se desenvolver a aplicação de um desses sistemas em um problema físico já existente, verificando sua correspondência com o caso não-dissipativo. O resultado foi a escolha de um sistema submetido a um banho térmico fracionário dissipativo.

Esta dissertação se justifica por conta de os modelos lagrangeanos existentes serem dos mais variados, porém muitos deles se preocupam com aplicações puramente matemáticas, sem avaliar se seus resultados são fisicamente aceitáveis. Um dos problemas do cálculo fracionário, a lei de expoentes, não é válida para todas as funções, o que se verá durante a leitura deste trabalho. Além disso, um modelo hamiltoniano dissipativo possibilita estudar sistemas de muitas partículas sob o ponto de vista termodinâmico estatístico, permitindo, então, estudar o banho térmico cujas partículas de banho perdem energia para o meio, seja em uma intensidade uniforme ou variável.

O presente trabalho foi dividido da seguinte forma. O Capítulo 2 descreve alguns fundamentos do Cálculo Fracionário Diferencial e Integral, com alguns exemplos de aplicação e formalismos necessários para a discussão dos problemas lagrangeano e hamiltoniano. No Capítulo 3, os trabalhos de Riewe e seus derivados são discutidos e analisados para potencial simples e dissipação, e comparados quanto à aplicação da lei de expoentes. E no Capítulo 4, o problema do sistema com banho térmico fracionário é desenvolvido com um dos formalismos apresentados no capítulo anterior.

2 FUNDAMENTOS DE CÁLCULO FRACIONÁRIO

2.1 FUNÇÕES ESPECIAIS

No Cálculo Fracionário, funções especiais aparecem de forma muito frequente. Sua proposta de generalizar o Cálculo Diferencial e Integral requer o uso de definições capazes de generalizar procedimentos de cálculo envolvendo números inteiros. Eles são descritos a seguir.

2.1.1 Fatorial e função gama

O fatorial de um número natural n , $n!$, é definido como:

$$n! = n(n-1) \cdots 1, \quad (2.1)$$

o produto dos n primeiros números naturais. Ele possui as propriedades:

$$n! = n(n-1)!, \quad (2.2a)$$

e

$$0! = 1, \quad (2.2b)$$

e aparece como resultado da integração:

$$n! = \int_0^\infty u^n e^{-u} du. \quad (2.3)$$

Estendendo o fatorial para números não-inteiros, a definição da função gama, denotada por $\Gamma(z)$ generaliza a Equação (2.3) (ARFKEN; WEBER, 2007):

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty u^{z-1} e^{-u} du. \quad (2.4)$$

Para z complexo, $Re(z) > 0$. $Re(z)$ denota a parte real de z .

Para $z = n$, n inteiro positivo, é obtida a seguinte correspondência entre as funções gama e fatorial:

$$\Gamma(n+1) = n!. \quad (2.5)$$

Logo, pela Equação (2.2b), $\Gamma(1) = 1$.

Também, por conta da definição da Equação (2.4):

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z). \quad (2.6)$$

Demonstração: partindo de $\Gamma(z+1)$ e usando a Equação (2.4), pode ser realizado o procedimento de integração por partes, integrando e^{-u} e derivando u^z :

$$\Gamma(z+1) = -u^z e^{-u} \Big|_{u=0}^{\infty} + z \int_0^{\infty} u^{z-1} e^{-u} du.$$

Pode ser verificado imediatamente que $u^z e^{-u}$ se anula para $u = 0$ e $u \rightarrow \infty$. Logo:

$$\Gamma(z+1) = z \int_0^{\infty} u^{z-1} e^{-u} du.$$

No membro esquerdo dessa equação, pode-se ver novamente a definição da função gama, Equação (2.4), e a Equação (2.6) é imediatamente obtida.

Entretanto, uma continuação analítica da função $\Gamma(z)$ pode ser feita para $z < 0$. Nesse caso, $\Gamma(z)$ pode ser escrita em função de $\Gamma(z+1)$ na Equação (2.6). Com isso, para n inteiro não-positivo, $\Gamma(n) = \pm\infty$. O gráfico da função gama está presente na Figura 1.

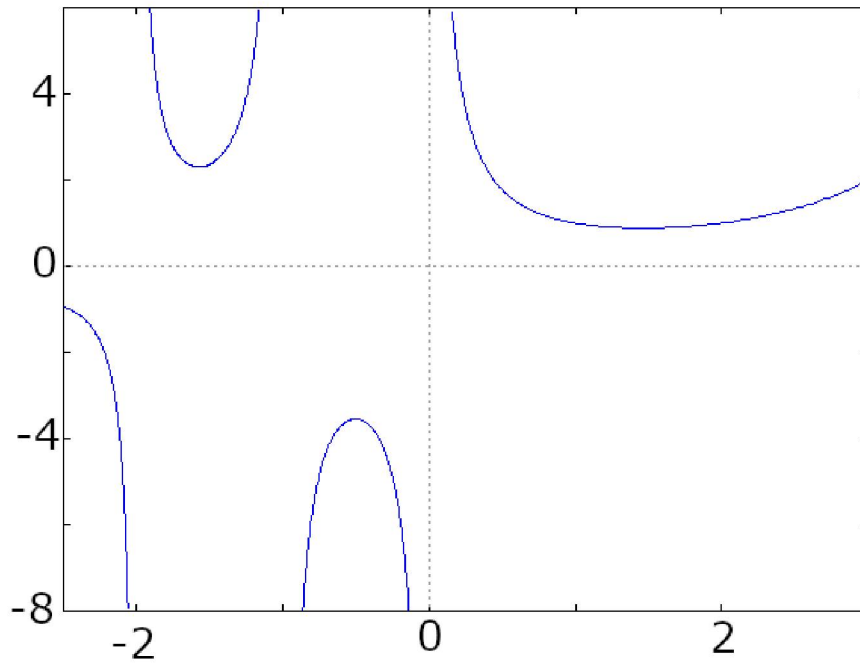


Figura 1 – Gráfico da Função $\Gamma(z)$ no intervalo $z \in [-2, 5; 3]$. Singularidades são presentes para todos os valores reais de z não-positivos.

Pela substituição $u = t^2$ na integral da Equação (2.4), a função $\Gamma(z)$ também pode ser escrita da forma (ARFKEN; WEBER, 2007):

$$\Gamma(z) = 2 \int_0^{\infty} t^{2z-1} e^{-t^2} dt. \quad (2.7)$$

Para $z = \frac{1}{2}$, a integral da Equação (2.7) se reduz à integral gaussiana. Ou seja:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}. \quad (2.8)$$

Ainda, por meio da Equação (2.7), é possível determinar integrações envolvendo a função e^{-ax^2} . Por meio da transformação de variável apropriada $t = \sqrt{a}x$, para $s \geq 0$ inteiro positivo e $a > 0$ constante:

$$\int_0^\infty x^{2s+1} e^{-ax^2} dx = \frac{\Gamma(s+1)}{2a^{s+1}}, \quad (2.9a)$$

$$\int_0^\infty x^{2s} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a^{s+1/2}} \Gamma\left(s + \frac{1}{2}\right). \quad (2.9b)$$

Uma função relacionada a esse assunto bastante frequente no cálculo fracionário é a **função gama incompleta**, definida como (ARFKEN; WEBER, 2007):

$$\gamma(a, x) = \int_0^x t^{a-1} e^{-t} dt, \quad (2.10)$$

com $Re(a) > 0$, e x uma variável real. Ela possui a seguinte forma em série, obtida por integração por partes:

$$\gamma(a, x) = e^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a)}{\Gamma(a+n+1)} x^{n+a}. \quad (2.11)$$

Essa função também pode ser encontrada na forma:

$$\gamma^*(a, x) = e^{-x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(a+n+1)}, \quad (2.12)$$

o asterisco sendo usado para diferenciá-la da definição da Equação (2.10). A relação entre ambas as definições, Equações (2.10) e (2.12) é:

$$\gamma(a, x) = \Gamma(a) x^a \gamma^*(a, x). \quad (2.13)$$

Gráficos comparativos das funções $\gamma(a, x)$ e $\gamma^*(a, x)$ estão na Figura 2. Propriedades da função gama incompleta podem ser verificadas em livros de Física-Matemática especializados (ARFKEN; WEBER, 2007).

2.1.2 Funções digama e beta

A função digama $\psi(z+1)$, segundo Arfken e Weber (2007) é definida como:

$$\psi(z+1) = \frac{d}{dz} \ln \Gamma(z+1). \quad (2.14)$$

Essa função também pode ser escrita em série de potências, na forma (ARFKEN; WEBER, 2007):

$$\psi(z+1) = -\gamma - \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{z+n} - \frac{1}{n} \right), \quad (2.15)$$

em que $\gamma = -0,577215664901 \dots$ é a constante de Euler-Mascheroni. O comportamento da função $\psi(z)$ pode ser visto na Figura 3.

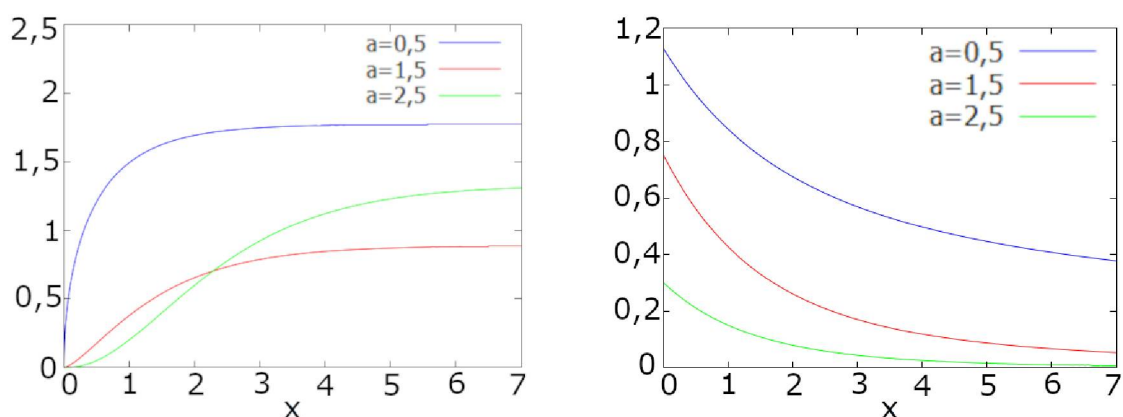


Figura 2 – Gráficos das funções $\gamma(a, x)$ (à esquerda) e $\gamma^*(a, x)$ (à direita) para três valores distintos de a .

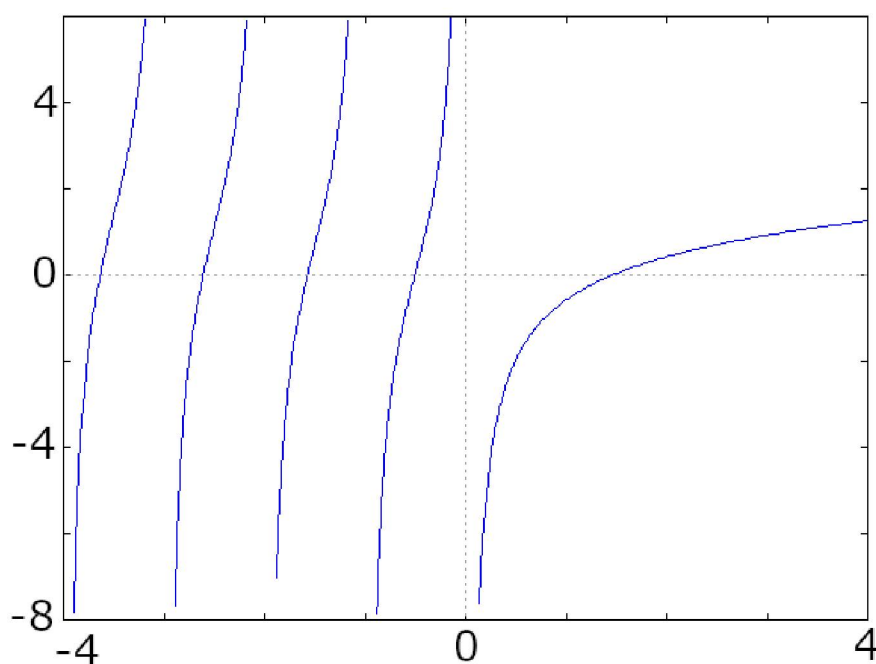


Figura 3 – Gráfico da Função $\psi(z)$ no intervalo $z \in [-4, 4]$.

A função $\psi(z+1)$ também surge ao estudar comportamento da variação da função gama. Aplicando a regra da cadeia no segundo membro da Equação (2.14) e isolando a derivada de $\Gamma(z+1)$:

$$\frac{d}{dz}\Gamma(z+1) = \Gamma(z+1)\psi(z+1). \quad (2.16)$$

O leitor pode buscar outras propriedades da função digama em livros especializados de Física Matemática (ARFKEN; WEBER, 2007).

A função beta $B(p, q)$, escrita em termos de funções gama (ARFKEN; WEBER,

2007):

$$B(p, q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}, \quad (2.17)$$

sob restrições $p, q > 0$, possui definições integrais nas formas (ARFKEN; WEBER, 2007):

$$B(p, q) = \int_0^1 x^{p-1} (1-x)^{q-1} dx, \quad (2.18a)$$

$$B(p, q) = 2 \int_0^{\pi/2} \cos^{2p-1} \theta \sin^{2q-1} \theta d\theta. \quad (2.18b)$$

A integral da Equação (2.18b) pode ser levada à integral da Equação (2.18a) por meio da transformação $x = \cos^2 \theta$.

Demonstração: sejam funções gama $\Gamma(p)$ e $\Gamma(q)$ escritos na forma integral conforme a Equação (2.7):

$$\Gamma(p)\Gamma(q) = 4 \int_0^\infty u^{2p-1} e^{-u^2} du \int_0^\infty v^{2q-1} e^{-v^2} dv.$$

Essas integrais podem ser combinadas em uma única integral dupla:

$$\Gamma(p)\Gamma(q) = 4 \int_0^\infty \int_0^\infty u^{2p-1} v^{2q-1} e^{-(u^2+v^2)} du dv.$$

O domínio D dessa integração é retangular, em $D = \{(u, v) \in \mathbb{R}^2 | u \geq 0 \text{ e } v \geq 0\}$. Esse pode ser reescrito em coordenadas polares, com $u = r \cos \theta$, $v = r \sin \theta$ e $D = \{(r, \theta) \in \mathbb{R}^2 | r \geq 0 \text{ e } 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}\}$. Logo, com a substituição $du dv = r dr d\theta$:

$$\Gamma(p)\Gamma(q) = 4 \int_0^{\pi/2} \int_0^\infty r^{2p+2q-1} e^{-r^2} \cos^{2p-1} \theta \sin^{2q-1} \theta dr d\theta.$$

Como os limites de integração são independentes das variáveis r e θ , as integrais podem ser separadas:

$$\Gamma(p)\Gamma(q) = 4 \int_0^\infty r^{2p+2q-1} e^{-r^2} dr \int_0^{\pi/2} \cos^{2p-1} \theta \sin^{2q-1} \theta d\theta.$$

Nessa equação, a integral em r pode ser calculada pela Equação (2.7):

$$\Gamma(p)\Gamma(q) = 2\Gamma(p+q) \int_0^{\pi/2} \cos^{2p-1} \theta \sin^{2q-1} \theta d\theta.$$

Isolando a integral em θ :

$$2 \int_0^{\pi/2} \cos^{2p-1} \theta \sin^{2q-1} \theta d\theta = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}.$$

Portanto, as definições integral e em termos de funções gama da função beta, Equações (2.17) e (2.18b), são equivalentes.

A forma integral da Equação (2.18a) aparece com frequência no Cálculo Fracionário. Mais detalhes sobre essa função se encontram em livros de Física-Matemática especializados, como o do Arfken e Weber (2007), e também em livros de cálculo fracionário (MILLER; ROSS, 1993; PODLUBNY, 1999).

2.1.3 Funções exponenciais generalizadas

O estudo de equações diferenciais incluindo cálculo fracionário demanda uma nova classe de funções especiais. A primeira delas é a **Exponencial de Miller-Ross**, definida como:

$$E_x(a, m) = x^a \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(mx)^j}{\Gamma(j + a + 1)}, \quad (2.19)$$

com a e m constantes que podem ser reais ou complexas, e x é a variável. Ela está relacionada com a função gama incompleta da seguinte forma:

$$E_x(a, m) = x^a e^{mx} \gamma^*(a, mx). \quad (2.20)$$

Essa forma pode ser utilizada para a geração de gráficos dessa exponencial generalizada, como os da Figura 4.

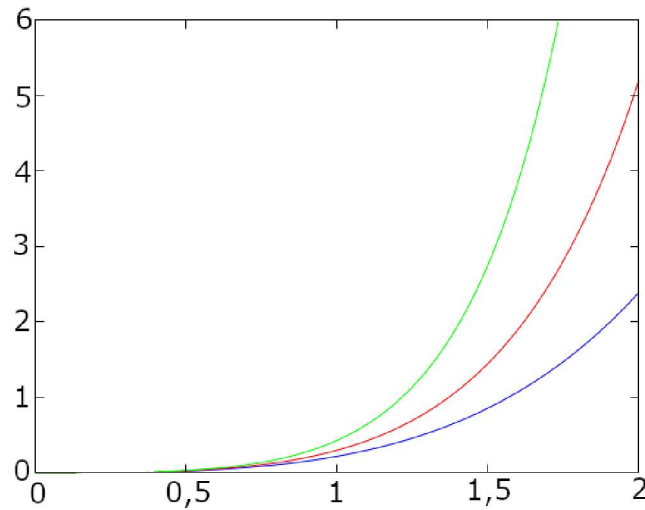


Figura 4 – Gráficos da função exponencial de Miller-Ross, Equação (2.19), para $a = 3$ e $m = 0,5$ (azul), $m = 1,5$ (vermelho) e $m = 2,5$ (verde).

A partir da exponencial de Miller-Ross, podem ser definidos o seno e o cosseno generalizado de Miller-Ross (funções $S_x(a, m)$ e $C_x(a, m)$), correspondendo, respectivamente, às partes real e imaginária da função $E_x(a, im)$, onde $i = \sqrt{-1}$. Suas respectivas formas em série são (MILLER; ROSS, 1993):

$$S_x(a, m) = x^a \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j (mx)^{2j+1}}{\Gamma(a + 2j + 2)}. \quad (2.21a)$$

$$C_x(a, m) = x^a \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j (mx)^{2j}}{\Gamma(a + 2j + 1)}, \quad (2.21b)$$

A forma dessas funções está na Figura 5. Algumas propriedades de interesse da exponencial de Miller-Ross e de funções derivadas estão no Apêndice A. O leitor pode encontrar propriedades adicionais no livro-texto de Miller e Ross (1993).

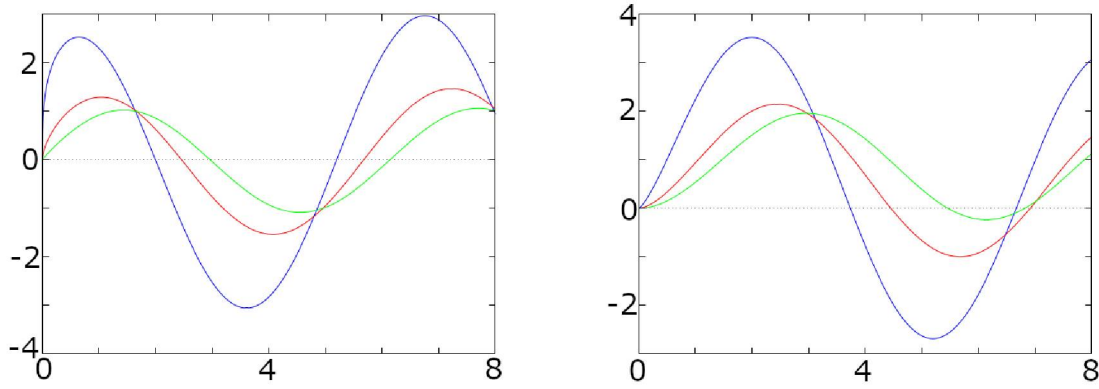


Figura 5 – Gráficos com as funções cosseno e seno de Miller-Ross (à esquerda e à direita, respectivamente). Para ambos, $m = 1$ e $a = 0,3$ (azul), $a = 0,6$ (vermelho) e $a = 0,9$ (verde).

Outra função exponencial generalizada que surge do cálculo diferencial fracionário é a **Exponencial de Mittag-Leffler**. A versão de um índice é dada por (PODLUBNY, 1999; ANDRADE; LIMA; DARTORA, 2018):

$$E_{\alpha}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(1 + n\alpha)}, \quad (2.22)$$

onde α em subscrito é o índice em questão, aparecendo também no argumento da função gama, no somatório do membro direito, e x é o argumento dessa função.

A versão da exponencial de Mittag-Leffler de dois índices α e β (que aparecem no subscrito) é definida como (PODLUBNY, 1999; ANDRADE; LIMA; DARTORA, 2018):

$$E_{\alpha,\beta}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{\Gamma(n\alpha + \beta)}, \quad (2.23)$$

com argumento x . Vê-se que a definição da Equação (2.22) é um caso especial da Equação (2.23). Essa exponencial é marcada por sua versatilidade em representar outras funções. Como o leitor pode verificar por expansão em série (PODLUBNY, 1999):

$$E_{1,1}(x) = e^x, \quad (2.24a)$$

$$E_{2,1}(x^2) = \cosh x, \quad (2.24b)$$

$$E_{2,2}(x^2) = \frac{\sinh x}{x}, \quad (2.24c)$$

$$E_{2,1}(-x^2) = \cos x, \quad (2.24d)$$

$$E_{2,2}(-x^2) = \frac{\sin x}{x}. \quad (2.24e)$$

Outros exemplos, assim como propriedades adicionais da exponencial de Mittag-Leffler, podem ser encontrados no livro de Ignor Podlubny sobre cálculo fracionário (PODLUBNY, 1999).

A exponencial de Miller-Ross, Equação (2.19), também pode ser escrita em termos da exponencial de Mittag-Leffler da seguinte maneira (PODLUBNY, 1999):

$$E_x(a, m) = x^a E_{1, a+1}(mx). \quad (2.25)$$

Um método comum no cálculo diferencial fracionário é a resolução de equações diferenciais por transformação de Laplace. Seja $F(s) = L\{f(x)\}$ a transformada de Laplace de uma função $f(x)$ tal que (PODLUBNY, 1999):

$$F(s) = \int_0^\infty f(x)e^{-sx} dx, \quad (2.26)$$

para uma classe de funções $f(x)$ cuja integração em (2.26) converge. De acordo com Podlubny (1999), uma transformada de Laplace da exponencial de Mittag-Leffler que ocorre frequentemente no processo de resolução de equações diferenciais é dada por:

$$L\{x^{\beta-1}E_{\alpha, \beta}(\pm ax^\alpha)\} = \frac{s^{\alpha-\beta}}{s^\alpha \mp a}, \quad (2.27)$$

com $Re(s) > |a|^{1/\alpha}$.

2.1.4 Função piso

Seja $\lfloor x \rfloor$ o maior valor menor ou igual a x real qualquer (ou seja, $\lfloor x \rfloor$ é o **piso** de x). A função $f(x) = \lfloor x \rfloor$, para $x \geq 0$, toma a parte inteira de qualquer valor de x , como, por exemplo, $\lfloor 3,75 \rfloor = 3$, $\lfloor \pi \rfloor = 3$ e $\lfloor e \rfloor = 2$. E para $x < 0$, toma-se o número negativo inferior mais próximo, como $\lfloor -0,5 \rfloor = -1$, $\lfloor -2\pi \rfloor = -7$ e $\left\lfloor -\frac{8}{5} \right\rfloor = -2$. Nota-se de imediato que $\lfloor -x \rfloor \neq -\lfloor x \rfloor$, pois, por exemplo, $-\lfloor 1,5 \rfloor = -1$ e $\lfloor -1,5 \rfloor = -2$.

A operação de tomar o piso de um número não é linear, pois, em geral, para três números reais x , y e k **não são sempre verdadeiras** as equações:

$$\lfloor x + y \rfloor = \lfloor x \rfloor + \lfloor y \rfloor, \quad (2.28a)$$

com o contra-exemplo $\lfloor 3, 4 + 4, 7 \rfloor = \lfloor 8, 1 \rfloor \neq \lfloor 3, 4 \rfloor + \lfloor 4, 7 \rfloor = 3 + 4 = 7$. E

$$\lfloor k \cdot x \rfloor = \lfloor k \rfloor \lfloor x \rfloor, \quad (2.28b)$$

de contra-exemplo $\lfloor 3 \cdot 2, 7 \rfloor = \lfloor 8, 1 \rfloor = 8 \neq \lfloor 3 \rfloor \lfloor 2, 7 \rfloor = 3 \cdot 2 = 6$.

Funções piso são muito utilizadas para a definição de operadores de derivação fracionária, explorados na Seção 2.3, fato justificado pela dependência de relações entre integração fracionária e derivação inteira, como se verá adiante.

2.2 INTEGRAL FRACIONÁRIA

Em oposição ao Cálculo Diferencial e Integral, no Cálculo Fracionário, a integração historicamente foi definida antes da derivação. Além disso, existe o fato de esta se incluir necessariamente nas definições de derivação.

Se forem realizadas n integrações de uma função em um intervalo fixo $[a, x]$, na forma:

$$I^n[f(x)] = \int_a^x \int_a^{x_1} \cdots \int_a^{x_{n-1}} f(x_n) dx_n dx_{n-1} \dots dx_1, \quad (2.29)$$

pode-se demonstrar, por indução, que essa expressão é equivalente a:

$$I^n[f(x)] = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} f(t) dt. \quad (2.30)$$

Essa expressão de integração de n camadas chama-se **Fórmula de Cauchy** (MILLER; ROSS, 1993; PODLUBNY, 1999).

Pode-se generalizar essa expressão ao trocar n por um número arbitrário, o qual pode ser real (desde que não-negativo) ou imaginário (com parte real não-negativa). Essa operação é chamada de **Integral de Riemann-Liouville à esquerda** de ordem α , e é dada por (PODLUBNY, 1999):

$${}_a I_x^\alpha[f(x)] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} f(t) dt, \quad (2.31)$$

(lê-se integral de Riemann-Liouville de $f(x)$ de a a x de ordem α). Os índices inferiores a e x representam o intervalo de integração, e o índice superior α , o grau de integração. Diz-se que essa operação é executada à esquerda porque ela integra sobre um intervalo localizado à esquerda de x . A operação de integração é **definida** por envolver um intervalo de integração $[a, x]$. Não existe correspondente à integração indefinida no cálculo fracionário.

A **Integral de Riemann-Liouville à direita** de ordem α como (PODLUBNY, 1999):

$${}_x I_b^\alpha[f(x)] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b (t-x)^{\alpha-1} f(t) dt, \quad (2.32)$$

(lê-se integral de Riemann-Liouville de $f(x)$ de x a b de ordem α). Os índices inferiores x e b representam o intervalo de derivação, e igual ao caso anterior, o índice superior α é o grau de integração. Diz-se que essa operação é executada à direita por ela integrar sobre um intervalo à direita de x . Em ambos os casos, o subíndice inferior esquerdo é o limite inferior de integração, enquanto que o subíndice inferior direito corresponde ao limite superior. Essa operação também é **definida** por envolver um intervalo de integração $[x, b]$.

Fazendo com que o índice $\alpha \rightarrow 0$, ambos os operadores de integração tendem à identidade, ou seja (PODLUBNY, 1999):

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} {}_a I_x^\alpha[f(x)] = f(x). \quad (2.33)$$

Os operadores de integração fracionária também são lineares, ou seja, para funções $f(x)$ e $g(x)$, e uma constante k :

$${}_a I_x^\alpha [f(x) + g(x)] = {}_a I_x^\alpha [f(x)] + {}_a I_x^\alpha [g(x)], \quad (2.34a)$$

$${}_a I_x^\alpha [kf(x)] = k {}_a I_x^\alpha [f(x)]. \quad (2.34b)$$

O mesmo pode ser dito para o operador ${}_x I_b^\alpha$.

A integral fracionária de Riemann-Liouville consegue reproduzir uma generalização apropriada para integrais inteiras de funções do tipo $f(x) = x^\lambda$, $\lambda \in \mathbb{R}$ e $\lambda > -1$. Enquanto que, para uma integração inteira n vezes, segue-se que:

$$I^n[x^\lambda] = \frac{1}{(\lambda + 1) \dots (n + \lambda)} x^{\lambda+n}.$$

Multiplicando ambos numerador e denominador por $\Gamma(\lambda + 1)$ e usando a propriedade da Equação (2.6) para o denominador n vezes:

$$I^n[x^\lambda] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + n + 1)} x^{\lambda+n}$$

A aplicação da Equação (2.31) para $a = 0$ e de ordem α sobre $f(x) = x^\lambda$ resulta em (MILLER; ROSS, 1993):

$${}_0 I_x^\alpha [x^\lambda] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + \alpha + 1)} x^{\lambda+\alpha}, \quad (2.35)$$

válida para $\lambda > -1$ e $\alpha > 0$. De modo semelhante a integração da função $f(x) = (x - a)^\lambda$ no intervalo $[a, x]$ resulta em:

$${}_a I_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + \alpha + 1)} (x - a)^{\lambda+\alpha}. \quad (2.36)$$

Demonstração: Usa-se $f(x) = (x - a)^\lambda$ sobre a definição, Equação (2.31):

$${}_a I_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x - t)^{\alpha-1} (t - a)^\lambda dt.$$

Fazendo a substituição $u = \frac{t-a}{x-a}$, os limites de integração mudam, com $t = a \rightarrow u = 0$ e $t = x \rightarrow u = 1$, e $dt = (x - a) du$. Logo:

$${}_a I_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = \frac{(x - a)^{\alpha+\lambda}}{\Gamma(\alpha)} \int_0^1 (1 - u)^{\alpha-1} u^\lambda du.$$

Com isso, a definição da função beta, Equação (2.17), pode ser usada:

$${}_a I_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = \frac{(x - a)^{\alpha+\lambda}}{\Gamma(\alpha)} \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + \alpha + 1)}.$$

Portanto, simplificando ambos $\Gamma(\alpha)$ de numerador e denominador, chega-se à Equação (2.36). A Equação (2.35) é um caso particular para $a = 0$.

Desta forma, funções descritíveis por série de potências em $x = a$ podem ser integradas termo a termo por meio da integração fracionária no intervalo $[a, x]$. Por exemplo, para uma função exponencial $f(x) = e^{\lambda(x-a)}$:

$${}_a I_x^\alpha [e^{\lambda(x-a)}] = E_{x-a}(\alpha, \lambda). \quad (2.37)$$

Demonstração: a exponencial $e^{\lambda(x-a)}$ pode ser escrita em série, a qual é uniformemente convergente. Logo, a integral pode ser aplicada a cada termo dessa série:

$${}_a I_x^\alpha [e^{\lambda(x-a)}] = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j}{j!} {}_a I_x^\alpha (x-a)^j.$$

Usando o resultado da Equação (2.36), o fatorial $j!$ de cada parcela do somatório acaba por ser cancelado, o que leva a:

$${}_a I_x^\alpha [e^{\lambda(x-a)}] = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j}{\Gamma(j+\alpha+1)} (x-a)^{j+\alpha}.$$

O membro esquerdo é a representação em série da exponencial de Miller-Ross, Equação (2.19). Portanto:

$${}_a I_x^\alpha [e^{\lambda(x-a)}] = E_{x-a}(\alpha, \lambda),$$

como se queria demonstrar.

Outros resultados de integração de funções de interesse são (MILLER; ROSS, 1993):

$${}_0 I_x^\alpha [\cos(\omega x)] = C_x(\alpha, \omega), \quad (2.38a)$$

$${}_0 I_x^\alpha [\sin(\omega x)] = S_x(\alpha, \omega). \quad (2.38b)$$

Demonstração: partindo da Equação (2.37), substituindo λ por $i\omega$, e fazendo $a = 0$:

$${}_0 I_x^\alpha [e^{i\omega x}] = E_x(\alpha, i\omega).$$

Entretanto, $e^{i\omega x} = \cos \omega x + i \sin \omega x$, e, pela definição de seno e cosseno de Miller-Ross, $E_x(\alpha, i\omega) = C_x(\alpha, \omega) + i S_x(\alpha, \omega)$. Por isso:

$${}_0 I_x^\alpha [\cos \omega x + i \sin \omega x] = C_x(\alpha, \omega) + i S_x(\alpha, \omega).$$

Como a integral de Riemann-Liouville é uma operação linear:

$${}_0 I_x^\alpha [\cos \omega x] + i {}_0 I_x^\alpha [\sin \omega x] = C_x(\alpha, \omega) + i S_x(\alpha, \omega).$$

Portanto, comparando as partes real e imaginária de ambos os membros dessa equação, são obtidas as Equações (2.38a) e (2.38b).

Ainda, a integral de $f(x) = x^\lambda \ln x$ é (MILLER; ROSS, 1993):

$${}_0I_x^\alpha [x^\lambda \ln x] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + \alpha + 1)} x^{\lambda + \alpha} [\ln x + \psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda + \alpha + 1)], \quad (2.39)$$

com $\lambda > -1$.

Demonstração: Seja aplicada a definição de integral fracionária, Equação (2.31), sobre a função $x^\lambda \ln x$:

$${}_0I_x^\alpha [x^\lambda \ln x] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^x (x - t)^{\alpha - 1} t^\lambda \ln t \, dt.$$

Seja realizada a substituição $t = xu$, fazendo com que $dt = x \, du$, e sejam realizadas as substituições de limite de integração $t = 0 \rightarrow u = 0$, e $t = x \rightarrow u = 1$. Logo, $\ln t = \ln u + \ln x$, $(x - t)^{\alpha - 1} = x^{\alpha - 1} (1 - u)^{\alpha - 1}$, $t^\lambda = x^\lambda u^\lambda$ e:

$${}_0I_x^\alpha [x^\lambda \ln x] = \frac{x^{\alpha + \lambda}}{\Gamma(\alpha)} \int_0^1 (1 - u)^{\alpha - 1} u^\lambda [\ln x + \ln u] \, du.$$

Essa integral pode ser dividida em duas partes:

$${}_0I_x^\alpha [x^\lambda \ln x] = \frac{x^{\alpha + \lambda}}{\Gamma(\alpha)} \left[\ln x \int_0^1 (1 - u)^{\alpha - 1} u^\lambda \, du + \int_0^1 (1 - u)^{\alpha - 1} u^\lambda \ln u \, du \right]. \quad (2.40)$$

A primeira integral do membro esquerdo dessa equação é igual à função beta, $B(\alpha, \lambda + 1)$, Equações (2.17) e (2.18a). A segunda integral, demonstrada no Apêndice A, tem como resultado:

$$\int_0^1 (1 - u)^{\alpha - 1} u^\lambda \ln u \, du = B(\alpha, \lambda + 1) [\psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda + \alpha + 1)],$$

onde $B(\alpha, \lambda + 1)$ é a função beta, Equação (2.17), e ψ é a função digama, Equação (2.14). Logo, usando esses resultados de integração para a Equação (2.40):

$${}_0I_x^\alpha [x^\lambda \ln x] = \frac{x^{\alpha + \lambda}}{\Gamma(\alpha)} B(\alpha, \lambda + 1) [\ln x + \psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda + \alpha + 1)].$$

Portanto, usando a Equação (2.17), ambos os $\Gamma(\alpha)$ da expressão resultante se cancelam:

$${}_0I_x^\alpha [x^\lambda \ln x] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + \alpha + 1)} x^{\lambda + \alpha} [\ln x + \psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda + \alpha + 1)],$$

como se queria demonstrar.

Pode-se entender a importância do intervalo de integração na complexidade do resultado integrando uma função do tipo potência $(x - c)^\lambda$ fora do intervalo $[c, x]$. Seja a integração, portanto, no intervalo $[a, x]$, $c < a$. Integrando em ordem α , é possível demonstrar que (Apêndice A):

$${}_cI_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = (a - c)^\lambda \Gamma(\lambda + 1) (x - a)^\alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(\lambda - n + 1) \Gamma(\alpha + n + 1)} \left(\frac{x - a}{c - a} \right)^n, \quad (2.41)$$

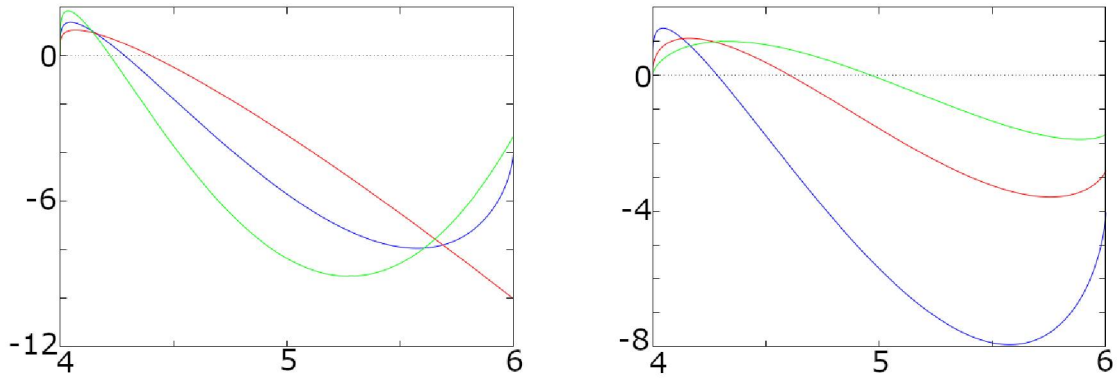


Figura 6 – Gráficos da função da Equação (2.41) para $a = 4$ e $c = 2$. No gráfico à esquerda, $\alpha = 0,2$ e $\lambda = 1,5$ (azul), $\lambda = 1$ (vermelho) e $\lambda = 2$ (verde). À direita, $\lambda = 1,5$, $\alpha = 0,2$ (azul), $\alpha = 0,4$ (vermelho) e $\alpha = 0,6$ (verde).

que converge, para λ não inteiro, no intervalo $[a, 2c - a]$. O leitor pode ver gráficos dessa função na Figura 6. Com isso, destaca-se a importância de que qualquer função integrada no intervalo $[a, x]$ seja descrita em série de $(x - a)$, pois a integração em algum intervalo diferente pode levar a inconveniências como um resultado em somatório duplo.

O operador integral de Riemann-Liouville respeita à lei dos expoentes. Ou seja, para ordens de integração α, β com parte real não-negativa, são válidas as relações (MILLER; ROSS, 1993; PODLUBNY, 1999):

$${}_a I_x^\alpha [{}_a I_x^\beta [f(x)]] = {}_a I_x^{\alpha+\beta} [f(x)] = {}_a I_x^\beta [{}_a I_x^\alpha [f(x)]], \quad (2.42a)$$

$${}_x I_b^\alpha [{}_x I_b^\beta [f(x)]] = {}_x I_b^{\alpha+\beta} [f(x)] = {}_x I_b^\beta [{}_x I_b^\alpha [f(x)]], \quad (2.42b)$$

contanto que as integrais ${}_a I_x^\beta [f(x)]$, ${}_a I_x^\alpha [f(x)]$, ${}_x I_b^\beta [f(x)]$ e ${}_x I_b^\alpha [f(x)]$ existam. Por essas equações, a operação de integração fracionária também é comutativa. A Equação (2.42a) é demonstrada por Miller e Ross (1993) e os detalhes são dados no Apêndice A.

Essa propriedade de integração sucessiva ajuda a compreender a integração das funções especiais obtidas pelo cálculo fracionário. Por exemplo, a integração de $f(x) = E_{x-a}(\beta, \lambda)$, para $\beta \geq 0$ e no intervalo $[a, x]$, resulta em:

$${}_a I_x^\alpha [E_{x-a}(\beta, \lambda)] = E_{x-a}(\alpha + \beta, \lambda). \quad (2.43)$$

Demonstração: Por conta da Equação (2.37), sabe-se que $E_{x-a}(\beta, \lambda) = {}_a I_x^\beta [e^{\lambda(x-a)}]$. Logo:

$${}_a I_x^\alpha [E_{x-a}(\beta, \lambda)] = {}_a I_x^\alpha [{}_a I_x^\beta [e^{\lambda(x-a)}]].$$

Aplicando então a lei de expoentes, Equação (2.42a):

$${}_a I_x^\alpha [E_{x-a}(\beta, \lambda)] = {}_a I_x^{\alpha+\beta} [e^{\lambda(x-a)}].$$

Portanto, usando o resultado da Equação (2.37):

$${}_a I_x^\alpha [E_{x-a}(\beta, \lambda)] = E_{x-a}(\alpha + \beta, \lambda),$$

como se queria demonstrar. Por série de potências em $(x - a)$, é possível demonstrar que esse resultado também vale para $-1 < \beta < 0$.

No estudo de sistemas dinâmicos envolvendo lagrangeana e hamiltoniana, é comum utilizar fórmulas de integração por partes para demonstrar princípios variacionais. Quanto à integral fracionária, a seguinte identidade se faz válida:

$$\int_a^b f(x) {}_a I_x^\alpha [g(x)] dx = \int_a^b {}_x I_b^\alpha [f(x)] g(x) dx. \quad (2.44)$$

A demonstração dessa igualdade encontra-se em livros de cálculo fracionário (PODLUBNY, 1999; MILLER; ROSS, 1993). Ela também encontra-se demonstrada no Apêndice A.

2.3 DERIVAÇÃO FRACIONÁRIA

Enquanto que a definição de integral no Cálculo Fracionário é única, o mesmo não pode ser dito da derivação. Das diversas definições que existem na literatura, serão discutidas neste trabalho duas das mais elementares, cuja diferença reside no fato de a derivação inteira não comutar com a integração fracionária. Seus diversos tipos dependem do entendimento do sistema físico de interesse e de suas propriedades. São eles: derivada de Riemann-Liouville e derivada de Caputo.

2.3.1 Derivada de Riemann-Liouville

A **Derivação à Esquerda de Riemann-Liouville** de ordem α no intervalo $[a, x]$ é definida como (MILLER; ROSS, 1993; PODLUBNY, 1999):

$${}_a D_x^\alpha [f(x)] = \frac{1}{\Gamma([\alpha] - \alpha + 1)} \left(\frac{d}{dx} \right)^{[\alpha]+1} \int_a^x (x - t)^{[\alpha] - \alpha} f(t) dt. \quad (2.45a)$$

O índice subscrito esquerdo a é o limite inferior de derivação, o subscrito direito x , o limite superior, e o sobreescrito direito α é a ordem de derivação. O operador de derivação fracionária é **não-local** por conta dessa dependência de um intervalo de derivação (neste caso, o intervalo $[a, x]$), em oposição à característica local da derivação inteira (que depende apenas do valor em x). Quando a variável x é interpretada como uma grandeza temporal, o operador ${}_a D_x^\alpha$ é chamado de **causal** porque leva em conta um intervalo anterior ao tempo atual.

A **Derivação à Direita de Riemann-Liouville** é (PODLUBNY, 1999):

$${}_x D_b^\alpha [f(x)] = \frac{1}{\Gamma([\alpha] - \alpha + 1)} \left(-\frac{d}{dx} \right)^{[\alpha]+1} \int_x^b (t - x)^{[\alpha] - \alpha} f(t) dt. \quad (2.45b)$$

De forma semelhante à primeira definição, o índice subscrito esquerdo x é o limite inferior de derivação, o subscrito direito b é o limite superior, e o sobrescrito superior direito α é a ordem de derivação. Esse operador também é **não-local** por depender de um intervalo de operação (neste caso, $[x, b]$). E quando x é interpretado como uma grandeza temporal, ${}_x D_b^\alpha$ é chamado de **anticausal** por levar em consideração um intervalo posterior ao tempo atual.

Usando $D = d/dx$ para representar a derivação inteira, as derivadas de Riemann-Liouville à esquerda e à direita podem ser representadas simbolicamente como, respectivamente:

$${}_a D_x^\alpha[f(x)] = D^{\lfloor\alpha\rfloor+1}\{ {}_a I_x^{\lfloor\alpha\rfloor-\alpha+1}[f(x)]\} \quad (2.46a)$$

e

$${}_x D_b^\alpha[f(x)] = (-D)^{\lfloor\alpha\rfloor+1}\{ {}_x I_b^{\lfloor\alpha\rfloor-\alpha+1}[f(x)]\}, \quad (2.46b)$$

com $\alpha > 0$ representando a ordem de derivação.

Porque tanto a integral fracionária quanto a derivação inteira de qualquer ordem são operações lineares, a derivada fracionária também o é. Por isso, para funções deriváveis $f(x)$ e $g(x)$ e uma constante k complexa:

$${}_a D_x^\alpha[f(x) + g(x)] = {}_a D_x^\alpha[f(x)] + {}_a D_x^\alpha[g(x)], \quad (2.47a)$$

$${}_a D_x^\alpha[kf(x)] = k {}_a D_x^\alpha[f(x)]. \quad (2.47b)$$

A linearidade também é válida para o operador ${}_x D_b^\alpha$.

Por vezes, é utilizada a representação ${}_a D_x^{-\alpha} = {}_a I_x^\alpha$ para a integração. Ainda, para $\alpha \rightarrow \lfloor\alpha\rfloor$:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \lfloor\alpha\rfloor} {}_a D_x^\alpha[f(x)] = D^{\lfloor\alpha\rfloor}[f(x)], \quad (2.48a)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow \lfloor\alpha\rfloor} {}_x D_b^\alpha[f(x)] = (-D)^{\lfloor\alpha\rfloor}[f(x)]. \quad (2.48b)$$

Demonstração: para a primeira equação, usando a definição simbólica, Equação (2.46a) e aplicando o limite $\alpha \rightarrow \lfloor\alpha\rfloor$:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \lfloor\alpha\rfloor} {}_a D_x^\alpha[f(x)] = D^{\lfloor\alpha\rfloor+1}\{ {}_a I_x^1[f(x)]\}.$$

Como $D^{\lfloor\alpha\rfloor+1} = D^{\lfloor\alpha\rfloor}D$, e:

$$\frac{d}{dx} \int_a^x f(t) dt = f(x),$$

$D^{\lfloor\alpha\rfloor}D {}_a I_x^1 = D^{\lfloor\alpha\rfloor}$, e:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \lfloor\alpha\rfloor} {}_a D_x^\alpha[f(x)] = D^{\lfloor\alpha\rfloor}[f(x)],$$

como na Equação (2.48a). Para a segunda equação, usando a definição simbólica, Equação (2.46b), aplicando o limite $\alpha \rightarrow \lfloor \alpha \rfloor$:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \lfloor \alpha \rfloor} {}_x D_b^\alpha [f(x)] = (-D)^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} \{ {}_x I_b^1 [f(x)] \}.$$

Ainda, $(-D)^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} = (-D)^{\lfloor \alpha \rfloor} (-D)$, e:

$$-\frac{d}{dx} \int_x^b f(t) dt = f(x).$$

Logo:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \lfloor \alpha \rfloor} {}_x D_b^\alpha [f(x)] = (-D)^{\lfloor \alpha \rfloor} [f(x)],$$

como na Equação (2.48b).

2.3.1.1 Aplicações a funções de interesse

Uma forma de testar a funcionalidade do operador de Riemann-Liouville é aplicando em alguns exemplos. Para a derivação inteira de uma função $f(x) = (x - a)^\lambda$, com p natural:

$$D^p [(x - a)^\lambda] = \lambda(\lambda - 1) \dots (\lambda - p + 1)(x - a)^{\lambda - p} = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - p + 1)} (x - a)^{\lambda - p}. \quad (2.49)$$

Isso pode ser demonstrado multiplicando numerador e denominador por $\Gamma(\lambda - p + 1)$ e aplicando a propriedade multiplicativa da função gama, Equação (2.6).

Seja $f(x) = (x - a)^\lambda$, integrável para $\lambda \geq -1$ no intervalo $[a, x]$. Pode-se demonstrar que:

$${}_a D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \alpha + 1)} (x - a)^{\lambda - \alpha} \quad (2.50)$$

Demonstração: Usando a definição da Equação (2.45a):

$${}_a D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = D^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} {}_a I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} [(x - a)^\lambda].$$

Considerando o resultado de integração fracionária da Equação (2.36):

$${}_a D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = D^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} \left[\frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda + \lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 2)} (x - a)^{\lambda + \lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} \right]$$

Levando em conta que a derivação é uma operação linear e usando o resultado da Equação (2.49), funções $\Gamma(\lambda + \lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 2)$ de numerador e denominador se cancelam e:

$${}_a D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \alpha + 1)} (x - a)^{\lambda - \alpha},$$

como se queria demonstrar. Esse resultado coincide com a derivação para ordem inteira, Equação (2.49). Deve-se ressaltar ainda que, para $\lambda - \alpha + 1 \leq 0$ e $\lambda - \alpha$ for um inteiro, então $\Gamma(\lambda - \alpha + 1)^{-1} = 0$, e ${}_a D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = 0$ como consequência.

Por conta do resultado da Equação (2.50), qualquer função $f(x)$ descritível como uma série de potências de $(x - a)$ possui uma derivada de Riemann-Liouville. Retornando ao exemplo da função exponencial $f(x) = e^{\lambda(x-a)}$, sua série de Taylor em torno de $x = a$ é uniformemente convergente no intervalo de números reais. Como o operador de derivação é linear, pode ser aplicado em cada termo da série:

$${}_aD_x^\alpha[e^{\lambda(x-a)}] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{k!} {}_aD_x^\alpha[(x-a)^k].$$

Aplicando, então, o resultado da Equação (2.50), $k!$ e $\Gamma(k+1)$ se cancelam, levando à seguinte expressão:

$${}_aD_x^\alpha[e^{\lambda(x-a)}] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda^k}{\Gamma(k-\alpha+1)} (x-a)^{k-\alpha}.$$

A série do membro direito coincide com a definição de exponencial de Miller-Ross da Equação (2.19) e, portanto:

$${}_aD_x^\alpha[e^{\lambda(x-a)}] = E_{x-a}(-\alpha, \lambda). \quad (2.51)$$

Funções de interesse para o cálculo fracionário também podem conter singularidades logarítmicas no valor inferior de limite de derivação. Por exemplo, se $f(x) = x^\lambda \ln x$, então (MILLER; ROSS, 1993):

$${}_0D_x^\alpha[x^\lambda \ln x] = \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-\alpha+1)} x^{\lambda-\alpha} [\ln x + \psi(\lambda+1) - \psi(\lambda-\alpha+1)], \quad (2.52)$$

válida para $\lambda > -1$ por envolver integração fracionária, Equação (2.39).

Como na integração fracionária, é do interesse que, ao derivar em ordem fracionária num intervalo $[a, x]$, a função calculada seja descrita em termos de série de $(x-a)$, evitando complicações como soluções em termos de série dupla. Um exemplo da importância desse procedimento é visível ao derivar uma potência $f(x) = (x-c)^\lambda$ em um intervalo $[a, x]$, com $c < a$:

$${}_aD_x^\alpha[(x-c)^\lambda] = (a-c)^\lambda \Gamma(\lambda+1) (x-a)^{-\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(n-\alpha+1)\Gamma(\lambda-n+1)} \left(\frac{x-a}{c-a}\right)^n, \quad (2.53)$$

convergente no intervalo $[a, 2c-a]$ para λ não inteiro. A forma dessa solução pode ser vista na Figura 7.

2.3.1.2 Lei de expoentes para derivação

Em oposição à integração fracionária, nem sempre é válida a lei de expoentes para a derivada de Riemann-Liouville:

$${}_aD_x^\alpha[{}_aD_x^\beta[f(x)]] = {}_aD_x^{\alpha+\beta}[f(x)]. \quad (2.54)$$

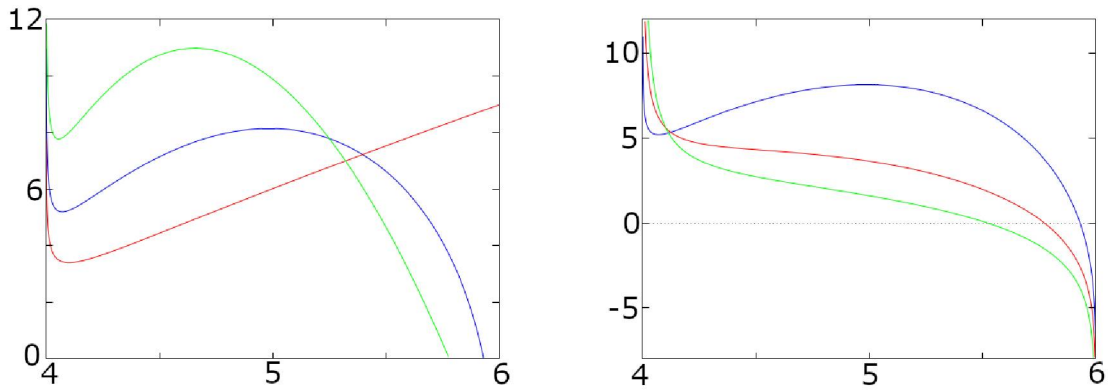


Figura 7 – Gráficos da função da Equação (2.53) para $a = 4$ e $c = 2$. No gráfico à esquerda, $\alpha = 0,2$ e $\lambda = 1,5$ (azul), $\lambda = 1$ (vermelho) e $\lambda = 2$ (verde). À direita, $\lambda = 1,5$, $\alpha = 0,2$ (azul), $\alpha = 0,4$ (vermelho) e $\alpha = 0,6$ (verde).

A aplicabilidade da lei de expoentes deve ser analisada caso a caso, para cada função. Por exemplo, ela é válida para potências do tipo $f(x) = (x - a)^\lambda$, desde que $\lambda - \beta > -1$, condição essa em que ${}_a D_x^\alpha [(x - a)^{\lambda - \beta}]$ existe e não é igual a zero.

Essa aplicabilidade também pode ser explorada para a função exponencial generalizada $E_{x-a}(\delta, \lambda)$, $\delta > -1$. Pode ser verificado que:

$${}_a D_x^\alpha [E_{x-a}(\delta, \lambda)] = E_{x-a}(\delta - \alpha, \lambda). \quad (2.55)$$

Demonstração: Seja usada a forma em série da exponencial de Miller-Ross, Equação (2.19):

$${}_a D_x^\alpha [E_{x-a}(\delta, \lambda)] = {}_a D_x^\alpha \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j}{\Gamma(j + \delta + 1)} (x - a)^{j + \delta}.$$

Essa série é uniformemente convergente. Então, como o operador de derivação é linear:

$${}_a D_x^\alpha [E_{x-a}(\delta, \lambda)] = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j}{\Gamma(j + \delta + 1)} {}_a D_x^\alpha [(x - a)^{j + \delta}].$$

Usando, então, a Equação (2.50) para derivação fracionária de potências:

$${}_a D_x^\alpha [E_{x-a}(\delta, \lambda)] = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\lambda^j}{\Gamma(j + \delta - \alpha + 1)} (x - a)^{j + \delta - \alpha}.$$

Portanto, usando novamente a definição de exponencial de Miller-Ross, Equação (2.19):

$${}_a D_x^\alpha [E_{x-a}(\delta, \lambda)] = E_{x-a}(\delta - \alpha, \lambda),$$

como se desejava demonstrar.

Dessa forma, também vale:

$${}_a D_x^{\alpha + \beta} [E_{x-a}(\delta, \lambda)] = E_{x-a}(\delta - \alpha - \beta, \lambda).$$

Porém, ${}_a D_x^\alpha [{}_a D_x^\beta [E_{x-a}(\delta, \lambda)]]$ só irá existir e ser igual a ${}_a D_x^{\alpha+\beta} [E_{x-a}(\delta, \lambda)]$ se $\lambda - \beta > -1$, condição em que ${}_a D_x^\alpha [E_{x-a}(\delta - \beta, \lambda)]$ irá existir.

Funções que cumprem a lei de expoentes para derivação, com as devidas restrições são uma classe especial nos estudos do cálculo fracionário. Então, desde que a derivação sucessiva exista, funções adicionais que obedecem à lei de expoentes para derivação no intervalo $[a, x]$: $C_{x-a}(\delta, \omega)$, $S_{x-a}(\delta, \omega)$ e $(x - a)^\lambda \ln(x - a)$, como podem ser verificadas pelo leitor. Essa verificação de condições é necessária para a validade da lei de expoentes em diversos problemas envolvendo equações diferenciais fracionárias, evitando, assim, a determinação de soluções inválidas.

Com isso, uma classe mais geral de funções pode ser caracterizada com base na aplicabilidade da lei de expoentes sobre $(x - a)^\lambda$ e $(x - a)^\lambda \ln(x - a)$. Seja uma função $\eta(x)$ tal que:

$$\eta(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j,$$

com todos os a_j constantes e $a_0 \neq 0$. Logo, funções dos seguintes formatos possuem derivada de Riemann-Liouville no intervalo $[0, x]$:

$$f(x) = x^\lambda \eta(x), \quad (2.56a)$$

$$f(x) = x^\lambda \ln x \eta(x), \quad (2.56b)$$

desde que $\lambda > -1$. Isso é justificado por conta da existência das derivações (2.50) e (2.52). Por extensão, as seguintes funções possuem derivação de Riemann-Liouville no intervalo $[a, x]$, desde que $\lambda > -1$:

$$f(x) = (x - a)^\lambda \eta(x - a), \quad (2.57a)$$

$$f(x) = (x - a)^\lambda \ln(x - a) \eta(x - a). \quad (2.57b)$$

Assim, a lei de expoentes, Equação (2.54), será aplicável somente se $\lambda - \beta > -1$.

2.3.1.3 Combinação entre integração e derivação fracionária de Riemann-Liouville

Propriedades convenientes para o estudo do cálculo fracionário aparecem na interação entre integrais e derivadas fracionárias. Situações análogas aos dois teoremas fundamentais do cálculo devem ser verificadas para o cálculo fracionário, o que ajuda na resolução de equações diferenciais específicas. Com o operador de derivação de Riemann-Liouville, destacam-se (PODLUBNY, 1999):

$${}_a D_x^\alpha [{}_a I_x^\alpha [f(x)]] = f(x), \quad (2.58a)$$

que, para $\alpha = 1$, corresponde a:

$$\frac{d}{dx} \int_a^x f(t) dt = f(x),$$

e

$${}_a I_x^\alpha [{}_a D_x^\alpha [f(x)]] = f(x) - \sum_{j=1}^{[\alpha]+1} [{}_a D_x^{\alpha-j} f(x)] \bigg|_{x=a} \frac{(x-a)^{\alpha-j}}{\Gamma(\alpha-j+1)}, \quad (2.58b)$$

que corresponde, para $\alpha = 1$, a:

$$\int_a^x \frac{df(t)}{dt} dt = f(x) - f(a).$$

As Equações (2.58a) e (2.58b) podem ser verificadas para outras quantidades inteiras de α , chegando a resultados que podem ser obtidos pelo cálculo inteiro. Por esse motivo, essas equações podem ser consideradas a versão fracionária do teorema fundamental do cálculo. Elas são essenciais para quaisquer operações que envolvam a aplicação de operadores inversos, como nas equações diferenciais fracionárias mais simples.

2.3.1.4 Transformada de Laplace e condições iniciais

Equações diferenciais ordinárias fracionárias com derivação de Riemann-Liouville apresentam uma dependência de condições iniciais com derivação fracionária. Isso pode ser verificado diretamente através da técnica de transformadas de Laplace. Seja $F(s) = L\{f(x)\}$ uma transformação de Laplace de uma função $f(x)$ tal que (PODLUBNY, 1999):

$$F(s) = \int_0^\infty f(x) e^{-sx} dx. \quad (2.59)$$

Logo, a transformada de Laplace de ${}_0 D_x^\alpha f(x)$ é dada por:

$$L\{{}_0 D_x^\alpha f(x)\} = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^n s^k [{}_0 D_x^{\alpha-k-1} f(x)] \bigg|_{x=0}. \quad (2.60)$$

Nessa equação, observa-se a presença das n condições iniciais fracionárias ${}_0 D_x^{\alpha-k-1} f(x)$ em $x = 0$. Em uma equação diferencial fracionária simples do tipo:

$${}_0 D_x^\alpha y(x) - \lambda y(x) = 0, \quad (2.61)$$

com $0 < \alpha < 1$, se $Y(s) = L\{y(x)\}$, então, aplicando a transformação de Laplace na Equação (2.61) e isolando $Y(s)$:

$$Y(s) = \frac{C_1}{s^\alpha - \lambda}, \quad (2.62)$$

com $C_1 = {}_0 I_x^{1-\alpha} f(x)|_{x=0}$. Da transformação de Laplace da Equação (2.27), usa-se a transformada inversa sobre a Equação (2.62), levando a um $y(x)$ dado por:

$$y(x) = C_1 x^{\alpha-1} E_{\alpha,\alpha}(\lambda x^\alpha). \quad (2.63)$$

A dependência de uma condição fracionária está na constante C_1 acompanhando o resultado. Um gráfico com a forma da solução, Equação (2.63), para diversos valores de α , está na Figura 8.

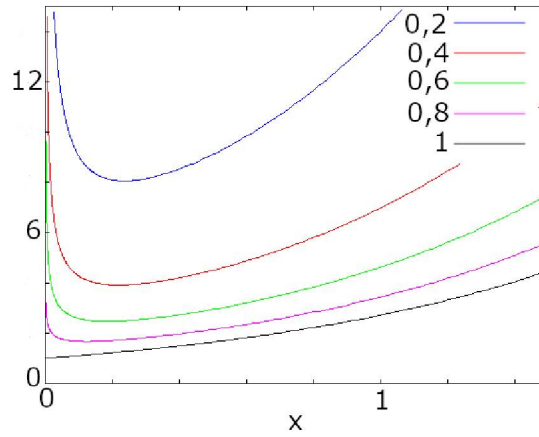


Figura 8 – Gráfico com a solução da equação diferencial, Equação (2.61), para ${}_0I_x^{1-\alpha} f(x)|_{x=0} = 1$, $\lambda = 1$ e cinco valores distintos de α .

2.3.2 Derivada de Caputo

A derivação de Caputo difere da derivação de Riemann-Liouville pela ordem em que a derivação inteira e a integração fracionária é aplicada. A **Derivada de Caputo à Esquerda** define-se como (PODLUBNY, 1999):

$${}_a^C D_x^\alpha [f(x)] = \frac{1}{\Gamma([\alpha] - \alpha + 1)} \int_a^x (x-t)^{[\alpha]-\alpha} D^{[\alpha]+1} [f(t)] dt, \quad (2.64a)$$

sendo a letra C no sobrescrito esquerdo acrescentada para diferenciar esse operador da derivação de Riemann-Liouville. A derivação é calculada no intervalo $[a, x]$. Por isso, a está no subscrito esquerdo, e x , no subscrito direito. O sobrescrito superior direito, α , representa a ordem de derivação fracionária. Esse operador é **não-local** por depender de um intervalo de diferenciação para operar, e ele é **causal** se x for interpretado como uma variável temporal (pois são tomados valores anteriores ao de x no intervalo de derivação).

A **Derivada de Caputo à Direita** é (PODLUBNY, 1999):

$${}_x^C D_b^\alpha [f(x)] = \frac{1}{\Gamma([\alpha] - \alpha + 1)} \int_x^b (t-x)^{[\alpha]-\alpha} (-D)^{[\alpha]+1} [f(t)] dt. \quad (2.64b)$$

A letra C no sobrescrito direito aqui também está sendo usada para diferenciar esse operador da derivação de Riemann-Liouville. A derivação é calculada no intervalo $[x, b]$. Por conta disso, x está no subscrito esquerdo e b no subscrito direito. O índice α no sobrescrito direito representa a ordem de derivação de Caputo. Esse operador de Caputo é **não-local** por depender de um intervalo de diferenciação para operar, e é **anticausal** se x for interpretado como uma variável temporal (pois são tomados valores posteriores ao de x no intervalo de derivação).

Em notação inteiramente simbólica, com $D = \frac{d}{dx}$, as derivadas de Caputo à esquerda e à direita são, respectivamente:

$${}_a^C D_x^\alpha [f(x)] = {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} \{D^{[\alpha]+1} [f(x)]\} \quad (2.65a)$$

e

$${}_x^C D_b^\alpha[f(x)] = {}_x I_b^{[\alpha]-\alpha+1}\{(-D)^{[\alpha]+1}[f(x)]\}, \quad (2.65b)$$

integrações fracionárias de uma derivada inteira. Por conta da linearidade da derivação inteira e da integração fracionária, o operador de Caputo também é linear. Ou seja, para funções $f(x)$ e $g(x)$ e constante k :

$${}_a^C D_x^\alpha[f(x) + g(x)] = {}_a^C D_x^\alpha[f(x)] + {}_a^C D_x^\alpha[g(x)], \quad (2.66a)$$

$${}_a^C D_x^\alpha[kf(x)] = k {}_a^C D_x^\alpha[f(x)]. \quad (2.66b)$$

A linearidade também é válida para o operador ${}_x^C D_b^\alpha$.

A derivação de Caputo é descontínua para α inteiro, apresentando limites laterais $\alpha \rightarrow [\alpha]^+$ e $\alpha \rightarrow [\alpha]^-$ distintos. Para $\alpha \rightarrow [\alpha]^+$, as Equações (2.65a) e (2.65b) resultam em:

$$\lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^+} {}_a^C D_x^\alpha[f(x)] = D^{[\alpha]}[f(x)] - D^{[\alpha]}[f(x)] \Big|_{x=a}, \quad (2.67a)$$

$$\lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^+} {}_x^C D_b^\alpha[f(x)] = (-D)^{[\alpha]}[f(x)] - (-D)^{[\alpha]}[f(x)] \Big|_{x=b}. \quad (2.67b)$$

E para $\alpha \rightarrow [\alpha]^-$, da Equação (2.33):

$$\lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^-} {}_a^C D_x^\alpha[f(x)] = D^{[\alpha]}[f(x)], \quad (2.68a)$$

e

$$\lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^-} {}_x^C D_b^\alpha[f(x)] = (-D)^{[\alpha]}[f(x)]. \quad (2.68b)$$

Demonstração. Tomando o limite $\alpha \rightarrow [\alpha]^+$ na Equação (2.65a):

$$\lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^+} {}_a^C D_x^\alpha[f(x)] = \lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^+} {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1}\{D^{[\alpha]+1}[f(x)]\} = {}_a I_x^1\{D^{[\alpha]+1}[f(x)]\}.$$

Integrando, então, em ordem 1, nessa equação:

$$\lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^+} {}_a^C D_x^\alpha[f(x)] = D^{[\alpha]}[f(x)] - D^{[\alpha]}[f(x)] \Big|_{x=a},$$

como mostrado na Equação (2.67a). Igualmente, tomando o limite $\alpha \rightarrow [\alpha]^-$ na Equação (2.65a):

$$\lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^-} {}_a^C D_x^\alpha[f(x)] = \lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^-} {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha}\{D^{[\alpha]}[f(x)]\} = {}_a I_x^0\{D^{[\alpha]}[f(x)]\}.$$

Como ${}_a I_x^0$ é igual ao operador identidade (Equação (2.33)):

$$\lim_{\alpha \rightarrow [\alpha]^-} {}_a^C D_x^\alpha[f(x)] = D^{[\alpha]}[f(x)],$$

como na Equação (2.68a). As demonstrações das Equações (2.67b) e (2.68b) são análogas.

Como consequência, a derivação de Caputo não tende à identidade quando o índice de derivação tende a zero, pois, por conta da Equação (2.67a):

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} {}^C D_x^\alpha [f(x)] = f(x) - f(a). \quad (2.69)$$

Por conta dessa descontinuidade do índice de derivação de Caputo para valores inteiros, as relações entre integração fracionária e derivação devem ser verificadas caso a caso. Por vezes é necessário usar a relação conhecida entre derivada de Caputo e derivada de Riemann-Liouville, na seção seguinte.

2.3.2.1 Relação com a derivação de Riemann-Liouville

Segundo Podlubny (1999), as derivadas de Caputo e de Riemann-Liouville se relacionam da seguinte forma:

$${}_a D_x^\alpha [f(x)] = {}^C D_x^\alpha [f(x)] + \sum_{k=0}^{\lfloor \alpha \rfloor} \frac{D^k [f(a)](x-a)^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)}. \quad (2.70)$$

Isso pode ser demonstrado por meio de expansão de $f(x)$ em série de $(x-a)$ e posterior diferenciação por ${}_a D_x^\alpha$. De modo semelhante, pode ser estabelecido que:

$${}_x D_b^\alpha [f(x)] = {}^C D_b^\alpha [f(x)] + \sum_{k=0}^{\lfloor \alpha \rfloor} \frac{(-D)^k [f(b)](b-x)^{k-\alpha}}{\Gamma(k-\alpha+1)}. \quad (2.71)$$

Desta forma, as relações entre derivadas de Caputo sucessivas e suas relações com integração fracionárias podem ser estabelecidas. Verifica-se a igualdade ${}_a D_x^\alpha [f(x)] = {}^C D_x^\alpha [f(x)]$ apenas se:

$$D^k [f(a)] = 0, \text{ com } k = 0, \dots, \lfloor \alpha \rfloor, \quad (2.72)$$

e ${}_x D_b^\alpha [f(x)] = {}^C D_b^\alpha [f(x)]$ somente se:

$$(-D)^k [f(b)] = 0, \text{ com } k = 0, \dots, \lfloor \alpha \rfloor. \quad (2.73)$$

Casos especiais devem ser considerados por verificação direta, e exemplos da sessão seguinte podem servir como comparação da aplicação de ambos os operadores de Riemann-Liouville e Caputo.

2.3.2.2 Aplicações em funções de interesse

Para que a derivada de Caputo ${}_a^C D_x^\alpha$ de uma função $f(x)$ exista, $f(x)$ deve ser $\lfloor \alpha \rfloor + 1$ vezes diferenciável. Além disso, se $f^{(\lfloor \alpha \rfloor + 1)}(x)$ for das classes (2.57a) e (2.57b) ou alguma de suas combinações lineares, a derivabilidade será garantida somente se qualquer singularidade que $f^{(\lfloor \alpha \rfloor + 1)}(x)$ possua deve ser do tipo x^λ ou $x^\lambda \ln x$, $\lambda > -1$. Logo, ${}_a^C D_x^\alpha [f(x)]$ existe se $\lambda > \lfloor \alpha \rfloor$ para $f(x)$.

Por exemplo, a derivação de Caputo de uma função $f(x) = (x - a)^\lambda$ retorna:

$${}_a^C D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = \begin{cases} \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \alpha + 1)} (x - a)^{\lambda - \alpha}, & \text{se } \lambda > \lfloor \alpha \rfloor, \\ 0, & \text{se } 0 \leq \lambda \leq \lfloor \alpha \rfloor \text{ e } \lambda \in \mathbb{N}, \\ \text{não existe,} & \text{em outros casos.} \end{cases} \quad (2.74)$$

Demonstração: começando com a definição de derivada de Caputo no intervalo $[a, x]$:

$${}_a^C D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = {}_a I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} D^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} (x - a)^\lambda.$$

Considerando a Equação (2.49) para derivação inteira, e considerando a linearidade do operador de integração fracionária para a constante:

$${}_a^C D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor)} {}_a I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} [(x - a)^{\lambda - \lfloor \alpha \rfloor - 1}].$$

Aplicando, então, a Equação (2.36) para integração fracionária, se $\lambda - \lfloor \alpha \rfloor > 0$ (para que a integração fracionária exista):

$${}_a^C D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \alpha + 1)} (x - a)^{\lambda - \alpha}.$$

Se λ for um inteiro não-negativo, porém menor do que $\lfloor \alpha \rfloor$, $D^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} [(x - a)^\lambda] = 0$, e, portanto, ${}_a^C D_x^\alpha [(x - a)^\lambda] = 0$. Em outros casos, a derivação não existe, como se queria demonstrar.

As derivações exponenciais são essenciais na resolução de equações diferenciais fracionárias lineares. Para a função exponencial $f(x) = e^{\lambda x}$, a derivada de Caputo de ordem α no intervalo $[0, x]$ leva a:

$${}_0^C D_x^\alpha e^{\lambda x} = \lambda^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} E_x(\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1, \lambda), \quad (2.75)$$

Demonstração: Usando a definição da derivação de Caputo, Equação (2.64a):

$${}_0^C D_x^\alpha [e^{\lambda x}] = {}_0 I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} D^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} e^{\lambda x}.$$

Como $D^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} e^{\lambda x} = \lambda^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} e^{\lambda x}$:

$${}_0^C D_x^\alpha [e^{\lambda x}] = \lambda^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} {}_0 I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} e^{\lambda x}.$$

Portanto, usando a Equação (2.37) para a integral fracionária de uma função exponencial:

$${}_0^C D_x^\alpha [e^{\lambda x}] = \lambda^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} E_x(\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1, \lambda),$$

como se desejava demonstrar.

Para a exponencial de Miller-Ross, a derivação de Caputo de ordem α no intervalo $[0, x]$ resulta em:

$${}_0^C D_x^\alpha [E_x(\delta, \lambda)] = \begin{cases} E_x(\delta - \alpha, \lambda), & \text{se } \delta > \lfloor \alpha \rfloor, \\ \lambda^{\lfloor \alpha \rfloor + 1 - \delta} E_x(\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1, \lambda), & \text{se } \delta \leq \lfloor \alpha \rfloor, \delta \in \mathbb{Z}, \\ \text{não existe,} & \text{em outros casos.} \end{cases} \quad (2.76)$$

Demonstração: Seja usada a definição da derivação de Caputo, Equação (2.64a):

$${}_0^C D_x^\alpha [E_x(\delta, \lambda)] = {}_0 I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} D^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} [E_x(\delta, \lambda)].$$

Usando a Equação (2.55) (pode ser usada, pois a derivação de Riemann-Liouville tende à derivação inteira para índice de derivação inteira):

$${}_0^C D_x^\alpha [E_x(\delta, \lambda)] = {}_0 I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} E_x(\delta - \lfloor \alpha \rfloor - 1, \lambda). \quad (2.77)$$

Aqui, existem três casos de subdivisão. O primeiro caso, para $\lambda > \lfloor \alpha \rfloor$, garante que a integração fracionária exista, e:

$${}_0^C D_x^\alpha [E_x(\delta, \lambda)] = E_x(\delta - \alpha, \lambda).$$

O segundo caso é $\delta \leq \lfloor \alpha \rfloor$ e $\lambda \in \mathbb{N}$. Nesse caso, pela propriedade da Equação (A.14b) (Apêndice A), $E_x(\delta - \lfloor \alpha \rfloor - 1, \lambda) = \lambda^{\lfloor \alpha \rfloor + 1 - \delta} e^{\lambda x}$. Logo, na Equação (2.77):

$${}_0^C D_x^\alpha [E_x(\delta, \lambda)] = \lambda^{\lfloor \alpha \rfloor + 1 - \delta} {}_0 I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} e^{\lambda x}$$

Usando então a Equação (2.37) para integral fracionária de uma função exponencial:

$${}_0^C D_x^\alpha [E_x(\delta, \lambda)] = \lambda^{\lfloor \alpha \rfloor + 1 - \delta} E_x(\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1, \lambda),$$

como se desejava demonstrar. Em qualquer outro caso, a derivação de Caputo não existe por conta de $E_x(\delta - \lfloor \alpha \rfloor - 1, \lambda)$ conter uma singularidade do tipo $x^{\delta - \lfloor \alpha \rfloor - 1}$, com $\delta - \lfloor \alpha \rfloor - 1 < -1$.

A derivada de Caputo de $\ln x$ no intervalo $[0, x]$ não existe, pois:

$$D^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} \ln x = D^{\lfloor \alpha \rfloor} x^{-1} = (-1)^{\lfloor \alpha \rfloor} (\lfloor \alpha \rfloor)! x^{-(\lfloor \alpha \rfloor + 1)}, \quad (2.78)$$

e a integral fracionária ${}_0 I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} x^{-(\lfloor \alpha \rfloor + 1)}$ não existe.

Para a função $f(x) = x^\lambda \ln x$, da Equação (2.52):

$$D^{\lfloor \alpha \rfloor + 1} f(x) = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor)} x^{\lambda - \lfloor \alpha \rfloor - 1} [\ln x + \psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor)], \quad (2.79)$$

pois ${}_0 D_x^\alpha f(x) \rightarrow D^{\lfloor \alpha \rfloor} f(x)$ quando $\alpha \rightarrow \lfloor \alpha \rfloor$. Logo, a derivada de Caputo de $f(x) = x^\lambda \ln x$ é:

$${}_0^C D_x^\alpha [x^\lambda \ln x] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \alpha + 1)} x^{\lambda - \alpha} [\ln x + \psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda - \alpha + 1)], \quad (2.80)$$

sob restrição $\lambda > \lfloor \alpha \rfloor$.

Demonstração. Usando a Equação (2.79) na definição de derivação de Caputo, Equação (2.64a):

$${}_0^C D_x^\alpha [x^\lambda \ln x] = {}_0 I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} \left\{ \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor)} x^{\lambda - \lfloor \alpha \rfloor - 1} [\ln x + \psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor)] \right\}.$$

Usando a propriedade de linearidade da integração fracionária:

$$\begin{aligned} {}_0^C D_x^\alpha [x^\lambda \ln x] &= \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor)} {}_0 I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} [x^{\lambda - \lfloor \alpha \rfloor - 1} \ln x] + \\ &+ \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor)} [\psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor)] {}_0 I_x^{\lfloor \alpha \rfloor - \alpha + 1} [x^{\lambda - \lfloor \alpha \rfloor - 1}]. \end{aligned}$$

Aplicando então as Equações (2.39) e (2.35) para as integrações respectivas de $x^{\lambda - \lfloor \alpha \rfloor - 1} \ln x$ e $x^{\lambda - \lfloor \alpha \rfloor - 1}$:

$$\begin{aligned} {}_0^C D_x^\alpha [x^\lambda \ln x] &= \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \alpha + 1)} x^{\lambda - \alpha} [\ln x + \psi(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor) - \psi(\lambda - \alpha + 1)] \\ &+ \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \alpha + 1)} x^{\lambda - \alpha} [\psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda - \lfloor \alpha \rfloor)] \end{aligned}$$

Portanto, somando as contribuições de ambos os fatores $x^{\lambda - \alpha}$:

$${}_0^C D_x^\alpha [x^\lambda \ln x] = \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{\Gamma(\lambda - \alpha + 1)} x^{\lambda - \alpha} [\ln x + \psi(\lambda + 1) - \psi(\lambda - \alpha + 1)].$$

como se queria demonstrar. Esse resultado é identico ao oferecido pela derivação de Riemann-Liouville, exceto pela condição adicional $\lambda > \lfloor \alpha \rfloor$.

2.3.2.3 Transformada de Laplace e condições iniciais

A vantagem do uso da derivação de Caputo está na sua relação com condições iniciais de derivação de índice inteiro em equações diferenciais, verificada em sua transformação de Laplace (PODLUBNY, 1999):

$$L\{{}_0^C D_x^\alpha f(x)\} = s^\alpha F(s) - \sum_{k=0}^n s^{\alpha-k-1} D^k f(x)|_{x=0}. \quad (2.81)$$

Um exemplo simples, para $0 < \alpha < 1$, pode ser verificado. Seja a equação diferencial fracionária:

$${}_0^C D_x^\alpha y(x) - \lambda y(x) = 0, \quad (2.82)$$

e seja $Y(s) = L\{y(x)\}$. Aplicando a transformação de Laplace na Equação (2.82) e isolando $Y(s)$:

$$Y(s) = y(0) \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda}. \quad (2.83)$$

Pela Equação (2.27), com $\beta = 1$, a aplicação da transformada inversa de Laplace à Equação (2.83) leva a:

$$y(x) = y(0)E_{\alpha,1}(\lambda x^\alpha). \quad (2.84)$$

A condição inicial de ordem inteira $y(0)$ pode ser verificada diretamente nessa equação. Essa curva, para diversos valores de α menores do que 1, pode ser visualizada na Figura 9.

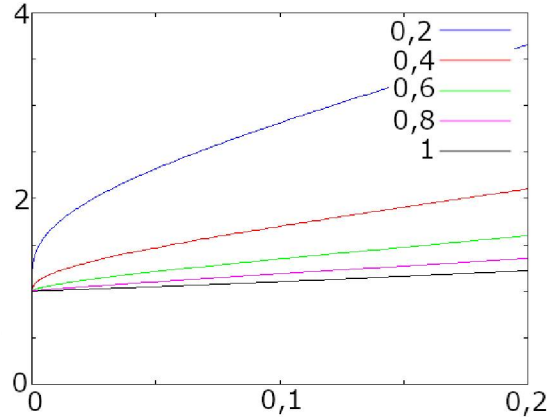


Figura 9 – Gráfico com a solução da equação diferencial, Equação (2.82), para $y(0) = 1$, $\lambda = 1$ e cinco valores distintos de α .

2.3.2.4 Integração por partes

Em diversos trabalhos, como de Agrawal (2002), Riewe (1996, 1997) e Muslih e Baleanu (2005), é apresentada ou utilizada a seguinte regra de integração por partes:

$$\int_a^b f(x) {}_a D_x^\alpha [g(x)] dx = \int_a^b {}_x D_b^\alpha [f(x)] g(x) dx. \quad (2.85)$$

Entretanto, essa regra não se verifica todas as vezes, funcionando apenas sobre um conjunto de restrições. A regra de integração por partes adequada, demonstrada no Apêndice A, é:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) {}_a D_x^\alpha [g(x)] dx &= (-D)^{[\alpha]} [f(x)] {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} [g(x)] \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \sum_{j=0}^{[\alpha]-1} (-D)^j f(x) \{ {}_a D_x^{\alpha-1-j} [g(x)] \} \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \int_a^b {}_x^C D_b^\alpha [f(x)] g(x) dx, \end{aligned} \quad (2.86)$$

e só vai acontecer

$$\int_a^b f(x) {}_a D_x^\alpha [g(x)] dx = \int_a^b {}_x^C D_b^\alpha [f(x)] g(x) dx \quad (2.87)$$

sob a condição

$$\sum_{j=0}^{[\alpha]-1} (-D)^j f(x) \{ {}_a D_x^{\alpha-1-j} [g(x)] \} \Big|_{x=a}^b = 0 \quad (2.88)$$

e

$$(-D)^{[\alpha]} [f(x)] {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} [g(x)] \Big|_{x=a}^b = 0. \quad (2.89)$$

E também, começando em:

$$\int_a^b f(x) {}_a^C D_x^\alpha [g(x)] dx, \quad (2.90)$$

é possível demonstrar (Apêndice A) que, através de integração por partes:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) {}_a^C D_x^\alpha [g(x)] dx &= {}_x I_b^{[\alpha]-\alpha+1} [f(x)] D^{[\alpha]} [g(x)] \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \sum_{j=1}^{[\alpha]} \{ {}_x D_b^{j-[\alpha]+\alpha-1} [f(x)] \} D^{[\alpha]-j} [g(x)] \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \int_a^b {}_x D_b^\alpha [f(x)] g(x) dx. \end{aligned} \quad (2.91)$$

E só ocorre:

$$\int_a^b f(x) {}_a^C D_x^\alpha [g(x)] dx = \int_a^b {}_x D_b^\alpha [f(x)] g(x) dx \quad (2.92)$$

se

$${}_x I_b^{[\alpha]-\alpha+1} [f(x)] D^{[\alpha]} [g(x)] \Big|_{x=a}^b = 0 \quad (2.93)$$

e

$$\sum_{j=1}^{[\alpha]} \{ {}_x D_b^{j-[\alpha]+\alpha-1} [f(x)] \} D^{[\alpha]-j} [g(x)] \Big|_{x=a}^b = 0. \quad (2.94)$$

Agrawal (2010) discute esses casos de integração por partes para esses operadores com uma notação diferenciada.

3 DINÂMICAS LAGRANGEANA E HAMILTONIANA FRACIONÁRIAS

Na literatura, existem as mais diversas formulações de problemas variacionais envolvendo lagrangeana e hamiltoniana e derivação fracionária. A revisão aqui se restringe a problemas que envolvem exclusivamente derivação de Riemann-Liouville e Caputo. Na revisão e análise desses problemas, foi estudado o problema da partícula sob potencial com dissipação para estudos de caso. No final, as características que se destacam para que a equação resultante do problema fracionário seja equivalente à equação diferencial com termo proporcional à velocidade são comparadas.

3.1 ABORDAGENS COM DERIVAÇÃO DE RIEMANN - LIOUVILLE

Riewe (1996, 1997) foi um dos pioneiros da elaboração de formalismos lagrangeano e hamiltoniano fracionários. Em 1996, ele publicou um artigo chamado *Nonconservative Lagrangian and Hamiltonian mechanics* (RIEWE, 1996) com o desenvolvimento variacional clássico dessas dinâmicas com as derivadas de Riemann-Liouville à esquerda e à direita, conduzindo-o às equações de Euler-Lagrange e de Hamilton e explorando um breve exemplo de aplicação de uma partícula sob potencial e dissipação. Também demonstra que a hamiltoniana não mais é uma constante de movimento, a não ser em casos especiais. No artigo seguinte, de 1997, intitulado *Mechanics with fractional derivatives* (RIEWE, 1997), ele obtém novamente, por princípios variacionais, as equações de Euler-Lagrange e de Hamilton correspondentes e, então, propõe o mecanismo de transformações canônicas e a teoria de Hamilton-Jacobi correspondente, além de propor novamente um modelo de dissipação linear e uma equação de onda para um formalismo quântico dissipativo.

A notação de Riewe corresponde ao livro de Oldham e Spanier, intitulado *The Fractional Calculus* (OLDHAM; SPANIER, 1974), e neste trabalho, utiliza-se a notação de Miller-Ross (MILLER; ROSS, 1993). Para a derivação à esquerda e à direita, respectivamente, a equivalência entre notações é (RIEWE, 1996; RIEWE, 1997):

$${}_a D_t^\alpha f(t) = \frac{d^\alpha f(t)}{d(t-a)^\alpha} \quad (3.1a)$$

e

$${}_t D_b^\alpha f(t) = (-1)^{-\alpha} \frac{d^\alpha f(t)}{d(t-b)^\alpha}. \quad (3.1b)$$

3.1.1 Abordagem de Riewe

Considere um sistema com R coordenadas generalizadas $q_{0,1}(t), \dots, q_{0,R}(t)$. Seja $q_{0,r}(t)$ a r -ésima coordenada generalizada desse sistema. Assim, $r = 1, \dots, R$. Sejam também os conjuntos de ordens de derivação $\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$ e $\{\beta_1, \dots, \beta_{N'}\}$. α_i é o i -ésimo grau de derivação fracionária no intervalo $[a, t]$, e β_j é o j -ésimo grau de derivação fracionária no intervalo $[t, b]$. Definem-se então as coordenadas generalizadas (RIEWE, 1997):

$$q_{j,r,b} = (-1)^{\beta_j} {}_t D_b^{\beta_j} [q_{0,r}(t)], \quad (3.2a)$$

com o subíndice j em q indicando que o j -ésimo grau de derivação β_j está sendo usado, r indica que é a r -ésima coordenada generalizada que está sendo derivada, e b mostrando que essa derivação está sendo feita no intervalo $[t, b]$. E também:

$$q_{i,r,a} = {}_a D_t^{\alpha_i} [q_{0,r}(t)], \quad (3.2b)$$

com o índice i indicando o uso do i -ésimo grau de derivação α_i , r indica que é a r -ésima coordenada generalizada do sistema dinâmico derivada, e a mostra que a derivação está sendo operada no intervalo $[a, t]$. Nessa notação, se $R = 1$, o subíndice r pode ser suprimido.

Se o sistema depende das R coordenadas generalizadas, de suas N derivações no intervalo $[a, t]$ e de suas N' derivações no intervalo $[t, b]$, então a integral de ação J é operada no intervalo $[a, b]$. A lagrangeana L desse sistema depende de todas as R coordenadas $q_{0,r}$, todas as RN variáveis $q_{i,r,a}$ e todas as RN' variáveis $q_{j,r,b}$, além do tempo t . Desta forma, pode-se escrever:

$$J = \int_a^b L(\{q_{0,r}, q_{1,r,a}, \dots, q_{N,r,a}, q_{1,r,b}, \dots, q_{N',r,b}\}_{r=1}^R, t) dt. \quad (3.3)$$

A notação $\{\}_{r=1}^R$ serve para indicar que a lista contém todas as coordenadas generalizadas e suas derivações de 1 até R .

Riewe (1996), através de cálculo variacional e minimização da integral de ação J , obtém as R equações de Euler-Lagrange para esse sistema:

$$\frac{\partial L}{\partial q_{0,r}} + \sum_{i=1}^{N'} {}_t D_b^{\alpha_i} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{i,r,a}} \right) + \sum_{j=1}^N (-1)^{\beta_j} {}_a D_t^{\beta_j} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{j,r,b}} \right) = 0. \quad (3.4)$$

Em seguida, os momentos generalizados são definidos como (RIEWE, 1996):

$$p_{j,r,b} = \sum_{k=0}^{N'-j-1} (-1)^{\beta_{k+j+1}-\beta_{j+1}} {}_a D_t^{\beta_{k+j+1}-\beta_{j+1}} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{k+j+1,r,b}} \right), \quad (3.5a)$$

com RN' momentos generalizados definidos dessa forma, e $j = 0, \dots, N' - 1$. E também:

$$p_{i,r,a} = \sum_{k=0}^{N'-i-1} {}_t D_b^{\alpha_{k+i+1}-\alpha_{i+1}} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{k+i+1,r,a}} \right), \quad (3.5b)$$

com RN momentos generalizados definidos dessa forma, e $i = 0, \dots, N - 1$. O autor usa essas definições de momento para definir a hamiltoniana em função da lagrangeana da seguinte forma:

$$H = \sum_{j=0}^{N-1} q_{j+1,r,b} p_{j,r,b} + \sum_{i=0}^{N'-1} q_{i+1,r,a} p_{i,r,a} - L. \quad (3.6)$$

Essa hamiltoniana é escrita em termos das R coordenadas generalizadas $q_{0,r}$, das $R(N-1)$ derivações $q_{i,r,a}$ ($i = 1, \dots, N-1$), das $R(N'-1)$ derivações $q_{j,r,b}$ ($j = 1, \dots, N'-1$), dos $R(N-1)$ momentos generalizados $p_{i,r,a}$ ($i = 1, \dots, N-1$) e dos $R(N'-1)$ momentos generalizados $p_{j,r,b}$ ($j = 1, \dots, N'-1$).

Para obter as equações canônicas correspondentes, Riewe (1996, 1997) escreve a integral de ação em termos da hamiltoniana:

$$J = \int_a^b \left(\sum_{r=1}^R \sum_{j=0}^{N-1} q_{j+1,r,b} p_{j,r,b} + \sum_{r=1}^R \sum_{i=0}^{N'-1} q_{i+1,r,a} p_{i,r,a} - H \right) dt. \quad (3.7)$$

Por cálculo variacional, considerando:

$$H = H(\{q_{0,r}, q_{1,r,a}, \dots, q_{N-1,r,a}, q_{1,r,b}, \dots, q_{N'-1,r,b}, p_{0,r,a}, \dots, p_{N-1,r,a}, p_{0,r,b}, \dots, p_{N'-1,r,b}\}_{r=1}^R, t), \quad (3.8)$$

as equações canônicas obtidas por Riewe foram:

$$\frac{\partial H}{\partial q_{j,r,b}} = (-1)^{\beta_{j+1}-\beta_j} {}_a D_t^{\beta_{j+1}-\beta_j} (p_{j,r,b}), \quad (3.9a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{j,r,b}} = q_{j+1,r,b}, \quad (3.9b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_{i,r,a}} = {}_t D_b^{\alpha_{i+1}-\alpha_i} (p_{i,r,a}), \quad (3.9c)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{i,r,a}} = q_{i+1,r,a}, \quad (3.9d)$$

e

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (3.9e)$$

Entretanto, Riewe faz o tratamento de suas deduções com o modelo de integração por partes da Equação (2.85) sem discutir suas limitações. Ele supõe que as derivações de Riemann-Liouville e de Caputo são iguais, partindo do princípio equivalente de integração por partes com integrais fracionárias na expressão, como na Equação (2.44).

Riewe também deixou um detalhe passar quanto à derivação parcial de H por $q_{0,r}$. Na verdade, a equação canônica para essa variável é:

$$\frac{\partial H}{\partial q_{0,r}} = {}_t D_b^{\alpha_1} p_{0,r,a} + {}_a D_t^{\beta_1} p_{0,r,b}, \quad (3.10)$$

que pode ser obtida ao seguir os procedimentos de Riewe para os termos em $i, j = 0$ nos somatórios. Equações similares foram obtidas por diversos autores que se seguiram (AGRAWAL, 2002; MUSLIH; BALEANU, 2005; AGRAWAL, 2007).

Ainda, a definição de coordenada $q_{j,r,b}$, Equação (3.2a), contém um fator $(-1)^{\beta_j}$ que se torna complexo, dependendo do grau de derivação β_j . Isso deve ser evitado sempre que possível quando se deseja estudar sistemas com muitas partículas, pois quantidades complexas podem dificultar o cálculo estatístico de sistemas caracterizáveis por coordenadas sob derivação fracionária.

Também é possível demonstrar que, pela presença da derivação fracionária nas equações de movimento, H não é mais uma constante de movimento em sistemas autônomos. Calculando a derivada temporal de H e usando a regra da cadeia:

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} = & \sum_{r=1}^R \left\{ \frac{\partial H}{\partial q_{0,r}} \frac{dq_{0,r}}{dt} + \sum_{i=1}^{N-1} \left[\frac{\partial H}{\partial q_{i,r,a}} \frac{dq_{i,r,a}}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_{i,r,a}} \frac{dp_{i,r,a}}{dt} \right] \right. \\ & \left. + \sum_{j=1}^{N'-1} \left[\frac{\partial H}{\partial q_{j,r,b}} \frac{dq_{j,r,b}}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p_{j,r,b}} \frac{dp_{j,r,b}}{dt} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Substituindo então as derivadas parciais das equações de movimento (3.9a)-(3.9d) e (3.10):

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} = & \sum_{r=1}^R \left\{ \left[{}_t D_b^{\alpha_1} p_{0,r,a} + {}_a D_t^{\beta_1} p_{0,r,b} \right] \frac{dq_{0,r}}{dt} + \sum_{i=1}^{N-1} \left[{}_t D_b^{\alpha_{i+1}-\alpha_i}(p_{i,r,a}) \frac{dq_{i,r,a}}{dt} + q_{i+1,r,a} \frac{dp_{i,r,a}}{dt} \right] \right. \\ & \left. + \sum_{j=1}^{N'-1} \left[(-1)^{\beta_{j+1}-\beta_j} {}_a D_t^{\beta_{j+1}-\beta_j}(p_{j,r,b}) \frac{dq_{j,r,b}}{dt} + q_{j+1,r,b} \frac{dp_{j,r,b}}{dt} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

O membro direito dessa equação não se anula em nenhuma outra circunstância além da condição que todos os expoentes de derivação $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ e $\beta_1, \dots, \beta_{N'}$ sejam inteiros. Logo, em geral, pelo menos uma coordenada generalizada sob derivação fracionária presente na hamiltoniana faz com que H autônomo deixe de ser uma constante de movimento, como Riewe (1996) demonstrou pela primeira vez. Isso pode ser estendido para qualquer formato de derivação fracionária colocado sobre as coordenadas generalizadas do sistema, com demonstrações análogas para todas as abordagens mostradas a seguir.

3.1.2 Abordagem de Agrawal de 2002

Com outra abordagem de coordenadas generalizadas, Agrawal (2002) analisou o mesmo problema variacional da lagrangeana contendo diversos operadores de Riemann-Liouville. Seja um sistema com R coordenadas generalizadas $q_{0,r}$, N ordens de derivação $\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$ sobre o intervalo $[a, t]$ e N' ordens de derivação $\{\beta_1, \dots, \beta_{N'}\}$ sobre o intervalo $[t, b]$. As derivações de todas as coordenadas generalizadas podem ser escritas sob a seguinte

notação:

$$q_{i,r,a} = {}_a D_t^{\alpha_i} [q_{0,r}(t)], \quad (3.12a)$$

com i indicando o uso do i -ésimo fator de derivação α_i , a indica a região de derivação $[a, t]$ e r serve para indicar que é a coordenada $q_{0,r}$ sendo derivada. E também:

$$q_{j,r,b} = {}_t D_b^{\beta_j} [q_{0,r}(t)], \quad (3.12b)$$

com j indicando o uso do j -ésimo fator de derivação β_j , b indica a região de derivação $[t, b]$ e r serve como indicação da derivação da coordenada $q_{0,r}$.

Por meio do cálculo variacional, as R equações de Euler-Lagrange obtidas são, para $r = 1, \dots, R$ (AGRAWAL, 2002):

$$\frac{\partial L}{\partial q_{0,r}} + \sum_{i=1}^N {}_t D_b^{\alpha_i} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{i,r,a}} \right) + \sum_{j=1}^{N'} {}_a D_t^{\beta_j} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{j,r,b}} \right) = 0, \quad (3.13)$$

com $L(\{q_{0,r}, q_{1,r,a}, \dots, q_{N,r,a}, q_{1,r,b}, \dots, q_{N',r,b}\}_{r=1}^R, t)$. Essas equações ainda são obtidas levando em consideração a integração por partes na Equação (2.85). Entretanto, trabalhos posteriores na área acabaram seguindo para uma abordagem de derivação sequencial, abordada na seção seguinte.

Ainda que Agrawal não tenha desenvolvido a parte hamiltoniana de seu formalismo, pode-se seguir a linha investigativa de Riewe (1997). Para tanto, os momentos fracionários relacionados à Equação de Euler-Lagrange (3.13) são:

$$p_{i,r,a} = \sum_{k=0}^{N-i-1} {}_t D_b^{\alpha_{k+i+1}-\alpha_{i+1}} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{k+i+1,r,a}} \right), \quad (3.14a)$$

com $i = 0, \dots, N-1$, e

$$p_{j,r,b} = \sum_{k=0}^{N'-j-1} {}_a D_t^{\beta_{k+j+1}-\beta_{j+1}} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{k+j+1,r,b}} \right). \quad (3.14b)$$

com $j = 0, \dots, N'-1$.

Logo, a hamiltoniana, dependente de variáveis na forma:

$$H = H(\{q_{0,r}, q_{1,r,a}, \dots, q_{N-1,r,a}, q_{1,r,b}, \dots, q_{N'-1,r,b}, p_{0,r,a}, \dots, p_{N-1,r,a}, p_{0,r,b}, \dots, p_{N'-1,r,b}\}_{r=1}^R, t), \quad (3.15)$$

relaciona-se à lagrangeana da mesma forma que a Equação (3.6).

Por técnicas de cálculo variacional usadas da mesma forma que Riewe, as equações canônicas de movimento obtidas para um sistema desse tipo são:

$$\frac{\partial H}{\partial q_{i,r,a}} = {}_t D_b^{\alpha_{i+1}-\alpha_i} (p_{i,r,a}), \quad (3.16a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{i,r,a}} = q_{i+1,r,a}, \quad (3.16b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_{j,r,b}} = {}_a D_t^{\beta_{j+1}-\beta_j}(p_{j,r,b}), \quad (3.16c)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{j,r,b}} = q_{j+1,r,b}. \quad (3.16d)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_{0,r}} = {}_t D_b^{\alpha_1} p_{0,r,a} + {}_a D_t^{\beta_1} p_{0,r,b}, \quad (3.16e)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (3.16f)$$

Essas equações conservam a mesma estrutura dos modelos elaborados anteriormente.

3.1.3 Aplicação - equação de movimento com dissipação linear

Como aplicação para dissipação por velocidade linear, sejam $\alpha_1 = \frac{1}{2}$ e $\alpha_2 = 1$, sem derivações no intervalo $[t, b]$. Com apenas uma coordenada, o índice r pode ser suprimido. Dessa forma, $q_{1,a} = {}_a D_t^{1/2} q_0$ e $q_{2,a} = Dq_0$ (D representa o operador de derivação inteira no tempo). Desta forma, a energia cinética pode ser escrita na forma:

$$T = \frac{1}{2} m q_{2,a}^2, \quad (3.17)$$

onde m é a massa do corpo. O potencial pode ser escrito na forma:

$$V(q_0, q_{1,a}) = \frac{1}{2} i \gamma q_{1,a}^2 + V(q_0), \quad (3.18)$$

em que γ é o coeficiente de dissipação, i é a quantidade imaginária $i = \sqrt{-1}$ e $V(q_0)$ é o potencial sob o qual o corpo está submetido. Logo, uma lagrangeana com esses termos seria:

$$L(q_0, q_{1,a}, q_{2,a}) = \frac{1}{2} m q_{2,a}^2 - \frac{1}{2} i \gamma q_{1,a}^2 - V(q_0). \quad (3.19)$$

Partindo das equações de Euler-Lagrange de Agrawal, Equação (3.13), a equação de movimento para uma partícula com essa lagrangeana é:

$$m D^2 q_0 + i \gamma {}_t D_b^{1/2} {}_a D_t^{1/2} q_0 + V'(q_0) = 0, \quad (3.20)$$

com $V'(q_0) = dV(q_0)/dq_0$. Para contornar o problema da derivação ${}_t D_b^{1/2} {}_a D_t^{1/2}$, que não tem aplicação de lei de expoentes, de modo geral, Riewe (1997) propõe fazer $b \rightarrow a^+$. Com isso, ${}_t D_b^{1/2} = -i {}_a D_t^{1/2}$, e a equação de movimento se torna:

$$m D^2 q_0 + \gamma D q_0 + V'(q_0) = 0, \quad (3.21)$$

desde que para as soluções dessa equação a lei de expoentes ${}_a D_t^{1/2} {}_a D_t^{1/2} q_0 = D q_0$ seja válida. Nesse caso, as equações (3.20) e (3.21) são equivalentes e possuem o mesmo conjunto de soluções para $b \rightarrow a^+$.

Para sistemas com lagrangeana sem dependência em $q_{1,b}$ e $q_{2,b}$, $p_{0,b} = 0$ e $p_{1,b} = 0$, de acordo com a Equação (3.14b). E pela Equação (3.14a), $p_{1,a} = mq_{2,a} = mDq_0$ e $p_{0,a} = -i\gamma q_{1,a} + m {}_tD_b^{1/2} Dq_0$. Levando isso em conta, e usando a Equação (3.6), a hamiltoniana correspondente a esse movimento é, com $N = 2$:

$$H = \frac{1}{2m} p_{1,a}^2 + p_{0,a} q_{1,a} + \frac{1}{2} i\gamma q_{1,a}^2 + V(q_0). \quad (3.22)$$

Aplicando, então, as Equações (3.16a)-(3.16d), o movimento da partícula pode ser definido através das equações:

$${}_tD_b^{1/2} p_{0,a} = V'(q_0), \quad (3.23a)$$

$${}_tD_b^{1/2} p_{1,a} = p_{0,a} + i\gamma q_{1,a}, \quad (3.23b)$$

$$q_{2,a} = \frac{p_{1,a}}{m}, \quad (3.23c)$$

e

$$q_{1,a} = {}_aD_t^{1/2} q_0. \quad (3.23d)$$

As duas últimas equações são definições. A composição das duas primeiras resulta na equação de movimento dependente somente das variáveis de posição, Equação (3.20).

3.2 ABORDAGEM COM DERIVAÇÃO DE RIEMANN - LI-OUVILLE SEQUENCIAL

Como uma proposta de aplicação em equações de movimento, Muslih e Baleanu (2005) se baseiam nos trabalhos de Riewe (RIEWE, 1996; RIEWE, 1997) para elaborar sua abordagem para modelos lagrangeano e hamiltoniano com base na seguinte definição de coordenadas generalizadas:

$$q_{i,r,a} = ({}_aD_t^\alpha)^i q_{0,r}(t), \quad (3.24a)$$

com o índice r indicando que a r -ésima coordenada generalizada do sistema está sendo derivada e a indica que as operações estão sendo realizadas no intervalo $[a, t]$, e

$$q_{j,r,b} = ({}_tD_b^\alpha)^j q_{0,r}(t), \quad (3.24b)$$

com o índice b indicando derivação no intervalo $[t, b]$. Com essa notação de derivação sucessiva, $({}_aD_t^\alpha)^i f(t)$ indica que a função $f(t)$ está sendo derivada i vezes sob o operador ${}_aD_t^\alpha$, e $({}_tD_b^\alpha)^n f(t)$ indica que $f(t)$ está sendo derivada j vezes sob o operador ${}_tD_b^\alpha$. Nesse modelo, o expoente de derivação α é fixo. No intervalo $[a, t]$, a derivação sucessiva é realizada no máximo N vezes (o que dá $i = 1, \dots, N$), e a derivação sucessiva em $[t, b]$ é operada no máximo N' vezes (o que leva a $i = 1, \dots, N'$).

3.2.1 Abordagem de Muslih e Baleanu

Com base nos trabalhos de Riewe, Muslih e Baleanu (2005), começando com uma lagrangeana dependente das R coordenadas generalizadas do sistema $(q_{0,1}, \dots, q_{0,R})$ e suas derivações, N delas no intervalo $[a, t]$, e N' vezes no intervalo $[t, b]$, Equações (3.24a) e (3.24b). Logo, $L = L(\{q_{0,r}, q_{1,r,a}, \dots, q_{N,r,a}, q_{1,r,b}, \dots, q_{N',r,b}\}_{r=1}^R, t)$. Com essas questões definidas, foram obtidas as R equações de Euler-Lagrange para esse modelo (MUSLIH; BALEANU, 2005):

$$\frac{\partial L}{\partial q_{0,r}} + \sum_{i=1}^N ({}_t D_b^\alpha)^i \left(\frac{\partial L}{\partial q_{i,r,a}} \right) + \sum_{j=1}^{N'} ({}_a D_t^\alpha)^j \left(\frac{\partial L}{\partial q_{j,r,b}} \right) = 0, \quad (3.25)$$

e, para desenvolver o formalismo hamiltoniano, eles definem os momentos generalizados da forma (MUSLIH; BALEANU, 2005):

$$p_{i,r,a} = \sum_{k=i+1}^N ({}_t D_b^\alpha)^{k-i-1} \frac{\partial L}{\partial q_{i,r,a}}, \quad (3.26a)$$

e

$$p_{j,r,b} = \sum_{k=j+1}^{N'} ({}_a D_t^\alpha)^{k-j-1} \frac{\partial L}{\partial q_{j,r,b}}. \quad (3.26b)$$

Muslih e Baleanu (2005) estabeleceram então a relação canônica entre a hamiltoniana e a lagrangeana na forma:

$$H = \sum_{r=1}^R \sum_{i=0}^{N-1} p_{i,r,a} q_{i+1,r,a} + \sum_{r=1}^R \sum_{j=1}^{N'-1} p_{j,r,b} q_{j+1,r,b} - L. \quad (3.27)$$

Por consequência, as equações canônicas de movimento obtidas por diferenciação são (MUSLIH; BALEANU, 2005):

$$\frac{\partial H}{\partial q_{i,r,a}} = {}_t D_b^\alpha(p_{i,r,a}), \quad (3.28a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_{j,r,b}} = {}_a D_t^\alpha(p_{j,r,b}), \quad (3.28b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_{0,r}} = {}_t D_b^\alpha(p_{0,r,a}) + {}_a D_t^\alpha(p_{0,r,b}), \quad (3.28c)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{i,r,a}} = q_{i+1,r,a} = {}_a D_t^\alpha(q_{i,r,a}), \quad (3.28d)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{j,r,b}} = q_{j+1,r,b} = {}_t D_b^\alpha(q_{j,r,b}), \quad (3.28e)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (3.28f)$$

Derivações parciais em $q_{i,r,a}$ e $p_{j,r,a}$ são tais que $i = 1, \dots, N$, e as em $q_{j,r,b}$ e $p_{j,r,b}$, $j = 1, \dots, N'$.

3.2.2 Aplicação da abordagem de Muslih e Baleanu

Uma forma de aplicação da abordagem de Muslih e Baleanu (2005) para uma partícula livre sob dissipação envolve utilizar o expoente de derivação $\alpha = 1/2$, levando a um termo de energia cinética proporcional a $q_{2,a}^2$ e um potencial dissipativo proporcional a $q_{1,a}^2$. Dessa forma, são definidos $q_{1,a} = {}_a D_t^{1/2}[q_0(t)]$ e $q_{2,a} = ({}_a D_t^{1/2})^2[q_0(t)]$. O subíndice r foi suprimido por haver apenas uma coordenada generalizada para esse sistema. O potencial de dissipação ainda pode conservar a forma $\frac{1}{2}i\gamma q_{1,a}$. A lagrangeana, então, assume a seguinte forma:

$$L = \frac{1}{2}m q_{2,a}^2 - \frac{1}{2}i\gamma q_{1,a}^2 - V(q_0). \quad (3.29)$$

Usando essa expressão na equação de Euler-Lagrange (3.25), o resultado obtido é:

$$m({}_t D_b^{1/2})^2 q_{2,a} - i\gamma {}_t D_b^{1/2} q_{1,a} - V'(q_0) = 0. \quad (3.30)$$

Desde que as condições da lei de expoentes sejam cumpridas por $q_0(t)$, pode-se fazer $({}_a D_t^{1/2})^2 q_0 = Dq_0$, e, desde que Dq_0 obedeça às mesmas condições, $({}_t D_b^{1/2})^2 Dq_0 = -D^2 q_0$. Além disso, aplicando o método de Riewe (1997) para remoção de anticausalidade, $b \rightarrow a^+$, a Equação (3.30) torna-se:

$$mD^2 q_0 + \gamma Dq_0 + V'(q_0) = 0, \quad (3.31)$$

uma equação de movimento com termo de dissipação proporcional à velocidade.

Os momentos generalizados para essa partícula, $p_{0,a}$ e $p_{1,a}$ são, de acordo com as Equações (3.26a):

$$p_{1,a} = m q_{2,a}, \quad (3.32a)$$

$$p_{0,a} = i\gamma q_{1,a} + m {}_t D_b^{1/2} q_{2,a}, \quad (3.32b)$$

e, pela Equação (3.26b), $p_{0,b} = 0 = p_{1,b}$.

Usando a Equação (3.27), a hamiltoniana para esse sistema é:

$$H(p_{0,a}, p_{1,a}, q_{0,a}, q_{1,a}) = \frac{p_{1,a}^2}{2m} + p_{0,a} q_{1,a} + \frac{1}{2}i\gamma q_{1,a}^2 + V(q_0). \quad (3.33)$$

Com isso, aplicando as equações canônicas (3.28a)-(3.28e) para essa hamiltoniana:

$${}_t D_b^{1/2}(p_{1,a}) = p_{0,a} + i\gamma q_{1,a}, \quad (3.34a)$$

$$V'(q_0) = {}_t D_b^{1/2} p_{0,a} \quad (3.34b)$$

$$q_{2,a} = \frac{p_{1,a}}{m}, \quad (3.34c)$$

e a Equação (3.28d) leva à identidade trivial $q_{1,a} = q_{1,a}$. A combinação apropriada das Equações (3.34a) e (3.34b) resulta na equação de movimento da partícula, Equação (3.30). Sua solução no limite $b \rightarrow a^+$ poderá ser obtida apenas na equivalência entre as derivações dessa e da Equação (3.31), o que deve ser diretamente verificado através da derivação das soluções.

3.2.3 Crítica ao modelo de Muslih e Baleanu - integração por partes

Entretanto, nas integrações por partes, Muslih e Baleanu recaem no mesmo problema de integração por partes que Riewe ao considerar sempre verdadeira a Equação (2.85), na equivalência entre operadores de Remann-Liouville e de Caputo. De modo geral, aplicando a Equação (2.86) p vezes, a fórmula mais geral para integração por partes de operadores sequenciais é:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(t)({}_a D_t^\alpha)^p[g(t)] dt &= \sum_{k=1}^p \sum_{j=0}^{[\alpha]} (-D)^j ({}_t^C D_b^\alpha)^{k-1}[f(t)] {}_a D_t^{\alpha-1-j} ({}_a D_t^\alpha)^{p-k}[g(t)] \Big|_{t=a}^b + \\ &+ \int_a^b ({}_t^C D_b^\alpha)^p[f(t)]g(t) dt. \end{aligned} \quad (3.35)$$

De modo mais simples, se $0 < \alpha < 1$:

$$\int_a^b f(t)({}_a D_t^\alpha)^p[g(t)] dt = \sum_{k=1}^p ({}_t^C D_b^\alpha)^{k-1}[f(t)] {}_a I_t^{1-\alpha} ({}_a D_t^\alpha)^{p-k}[g(t)] \Big|_{t=a}^b + \int_a^b ({}_t^C D_b^\alpha)^p[f(t)]g(t) dt. \quad (3.36)$$

Então, para que ocorra:

$$\int_a^b f(t)({}_a D_t^\alpha)^p[g(t)] dt = \int_a^b ({}_t^C D_b^\alpha)^p[f(t)]g(t) dt, \quad (3.37)$$

As $p([\alpha] + 1)$ restrições devem acontecer:

$$\sum_{k=1}^p \sum_{j=0}^{[\alpha]} (-D)^j ({}_t^C D_b^\alpha)^{k-1}[f(t)] {}_a D_t^{\alpha-1-j} ({}_a D_t^\alpha)^{p-k}[g(t)] \Big|_{t=a}^b = 0. \quad (3.38)$$

De forma similar para o operador sequencial $({}_t D_b^\alpha)^p$, a equação correspondente de integração por partes seria, com base na Equação (2.91):

$$\begin{aligned} \int_a^b f(t)({}_t D_b^\alpha)^p[g(t)] dt &= \sum_{k=1}^p \sum_{j=0}^{[\alpha]} (-D)^j ({}_a^C D_t^\alpha)^{k-1}[f(t)] {}_t D_b^{\alpha-1-j} \{({}_t D_b^\alpha)^{p-k}[g(t)]\} \Big|_{t=a}^b + \\ &+ \int_a^b ({}_a^C D_t^\alpha)^p[f(t)]g(t) dt. \end{aligned} \quad (3.39)$$

As condições para que aconteça:

$$\int_a^b f(t)({}_t D_b^\alpha)^p[g(t)] dt = \int_a^b ({}_a^C D_t^\alpha)^p[f(t)]g(t) dt \quad (3.40)$$

devem ser tais que:

$$\sum_{k=1}^p \sum_{j=0}^{[\alpha]} (-D)^j ({}_a^C D_t^\alpha)^{k-1} [f(t)] {}_t D_b^{\alpha-1-j} \{({}_t D_b^\alpha)^{p-k} [g(t)]\} \Big|_{t=a}^b = 0. \quad (3.41)$$

E, de modo mais simples, para $0 < \alpha < 1$:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(t) ({}_t D_b^\alpha)^p [g(t)] dt &= \sum_{k=1}^p ({}_a^C D_t^\alpha)^{k-1} [f(t)] {}_t I_b^{1-\alpha} \{({}_t D_b^\alpha)^{p-k} [g(t)]\} \Big|_{t=a}^b + \\ &+ \int_a^b ({}_a^C D_t^\alpha)^p [f(t)] g(t) dt. \end{aligned} \quad (3.42)$$

3.3 ABORDAGEM COM DERIVAÇÃO DE CAPUTO

Fundamentalmente, existem duas possibilidades a explorar. A primeira, proposta por Agrawal (2007) lida com coordenadas generalizadas de derivação direta, como a de Riewe (1997), porém com derivação de Caputo ao invés do operador de Riemann-Liouville.

3.3.1 Abordagem de Agrawal de 2007

Seja um sistema com R coordenadas generalizadas $(q_{0,1}, \dots, q_{0,R})$. Nesse sistema, se fazem presentes N derivações fracionárias dessas coordenadas no intervalo $[a, t]$, com um conjunto de expoentes de derivação $\{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$, aparecendo com a notação:

$$q_{i,r,a} = {}_a^C D_t^{\alpha_i} q_{0,r}, \quad (3.43a)$$

onde i indica que o i -ésimo expoente de derivação α_i está sendo utilizado para derivação de Caputo, r indica que é a r -ésima coordenada generalizada está sendo derivada, e a indica que o intervalo de derivação é $[a, t]$. E também aparecem N' derivações fracionárias no intervalo $[t, b]$, com um conjunto de expoentes $\{\beta_1, \dots, \beta_{N'}\}$, na forma:

$$q_{j,r,b} = {}_t^C D_b^{\beta_j} q_{0,r}, \quad (3.43b)$$

com j indicando o uso do j -ésimo expoente de derivação, r a r -ésima coordenada $q_{0,r}$ sendo derivada, e b indicando que as derivações estão sendo realizadas no intervalo $[t, b]$.

Partindo de uma lagrangeana com apenas uma coordenada generalizada, no formato $L(q_0, q_{1,a}, \dots, q_{N,a}, q_{1,b}, \dots, q_{N',b}, t)$, para todos os $\alpha_i > 0$ e todos os $\beta_j < 1$, Agrawal (2007) obteve, por cálculo variacional:

$$\frac{\partial L}{\partial q_0} + \sum_{i=1}^N {}_x D_b^{\alpha_i} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{i,a}} \right) + \sum_{j=1}^{N'} {}_a D_t^{\beta_j} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{j,b}} \right) = 0. \quad (3.44)$$

Nota-se que, nesse artigo, o autor se preocupou com a integração por partes por considerar a Equação (2.87).

Em outro trabalho, para uma lagrangeana mais simples $L(q_0, q_{1,a}, q_{1,b}, t)$, Baleanu e Agrawal (2006), começando a definir os momentos generalizados por:

$$p_{0,a} = \frac{\partial L}{\partial q_{1,a}}, \quad (3.45a)$$

$$p_{0,b} = \frac{\partial L}{\partial q_{1,b}}. \quad (3.45b)$$

relacionaram a lagrangeana e a hamiltoniana de um sistema desse tipo da seguinte maneira:

$$H = p_{0,a}q_{1,a} + p_{0,b}q_{1,b} - L, \quad (3.46)$$

com $H = (p_{0,a}, p_{0,b}, q_0)$.

Então, seguindo os cálculos de Riewe (1997), as equações canônicas obtidas a partir dessa hamiltoniana são (BALEANU; AGRAWAL, 2006):

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}, \quad (3.47a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{0,a}} = q_{1,a}, \quad (3.47b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{0,b}} = q_{1,b}, \quad (3.47c)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_0} = {}_tD_b^\alpha p_{0,a} + {}_aD_t^\beta p_{0,b}. \quad (3.47d)$$

Entretanto, o modelo hamiltoniano pode ser estendido para quaisquer conjuntos de coordenadas, bem como para ordens de derivação α_i e β_j adicionais. Seguindo, então, de uma lagrangeana $L = L(\{q_{0,r}, q_{1,r,a}, \dots, q_{N,r,a}, q_{1,r,b}, \dots, q_{N',r,b}\}_{r=1}^R, t)$, as R equações de Euler-Lagrange que podem ser obtidas são:

$$\frac{\partial L}{\partial q_{0,r}} + \sum_{i=1}^N {}_x D_b^{\alpha_i} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{i,r,a}} \right) + \sum_{j=1}^{N'} {}_a D_t^{\beta_j} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{j,r,b}} \right) = 0. \quad (3.48)$$

Os momentos generalizados, de forma análoga aos trabalhos anteriores, podem ser definidos como:

$$p_{i,r,a} = \sum_{k=0}^{N-i-1} {}_t D_b^{\alpha_{k+i+1}-\alpha_{i+1}} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{k+i+1,r,a}} \right), \quad (3.49a)$$

e

$$p_{j,r,b} = \sum_{k=0}^{N'-j-1} {}_a D_t^{\beta_{k+j+1}-\beta_{j+1}} \left(\frac{\partial L}{\partial q_{k+j+1,r,b}} \right), \quad (3.49b)$$

assim como o proposto no primeiro modelo de Agrawal (2002).

Para uma hamiltoniana do tipo:

$$H = H(\{q_{0,r}, q_{1,r,a}, \dots, q_{N-1,r,a}, p_{1,r,a}, \dots, p_{N-1,r,a}, q_{1,r,b}, \dots, q_{N'-1,r,b}, p_{1,r,b}, \dots, p_{N'-1,r,b}\}_{r=1}^R, t), \quad (3.50)$$

sua relação com a lagrangeana desse sistema deve ser:

$$H = \sum_{n=0}^{N-1} p_{n,r,a} q_{n+1,r,a} + \sum_{n=0}^{N'-1} p_{n,r,b} q_{n+1,r,b} - L. \quad (3.51)$$

Usando então a linha de dedução de Riewe (1997) para a dedução das equações canônicas de movimento por princípio variacional, são obtidos os resultados:

$$\frac{\partial H}{\partial q_{i,r,a}} = {}_tD_b^{\alpha_{i+1}-\alpha_i}(p_{i,r,a}), \quad n \geq 1, \quad (3.52a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_{j,r,b}} = {}_aD_t^{\beta_{j+1}-\beta_j}(p_{j,r,b}), \quad n \geq 1, \quad (3.52b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{i,r,a}} = q_{i+1,r,a}, \quad (3.52c)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{j,r,b}} = q_{j+1,r,b}, \quad (3.52d)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_{0,r}} = {}_tD_b^{\alpha_1} p_{0,r,a} + {}_aD_t^{\beta_1} p_{0,r,b}, \quad (3.52e)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (3.52f)$$

3.3.2 Aplicação do modelo de Agrawal de 2007

Mantendo a lagrangeana da mesma forma que em outros modelos, apenas ajustando a definição de coordenadas generalizadas de acordo, e um conjunto de expoentes $\{1/2, 1\}$:

$$L(q_0, q_{1,a}, q_{2,a}) = \frac{1}{2} q_{2,a}^2 - \frac{1}{2} i\gamma q_{1,a}^2 - V(q_0), \quad (3.53)$$

com $q_{1,a} = {}_a^C D_t^{1/2} q_0$ e $q_{2,a} = Dq_0$. A equação de movimento da partícula correspondente pode ser obtida das equações de Euler-Lagrange do modelo, Equação (3.48):

$$mD^2 q_0 + i\gamma {}_tD_b^{1/2} ({}_a^C D_t^{1/2} q_0) + V'(q_0) = 0. \quad (3.54)$$

No limite $b \rightarrow a^+$, para que essa equação se transforme no modelo dissipativo em consideração, Equação (3.31), é necessário que a solução seja tal que ${}_aD_t^{1/2} {}_a^C D_t^{1/2} q_0 = Dq_0$. Os momentos generalizados são:

$$p_{1,a} = mDq_0, \quad (3.55)$$

$$p_{0,a} = -i\gamma q_{1,a} + m {}_tD_b^{1/2} Dq_0. \quad (3.56)$$

A hamiltoniana conserva a mesma forma que em modelos anteriores, e as equações canônicas de movimento são, além das triviais:

$$p_{0,a} + i\gamma q_{1,a} = {}_tD_b^{1/2} p_{1,a}, \quad (3.57a)$$

$$V'(q_0) = {}_tD_b^{1/2} p_{0,a}, \quad (3.57b)$$

como nos outros modelos.

3.4 COORDENADAS GENERALIZADAS DE KLIMEK

O principal problema encarado pela dinâmica fracionária lagrangeana e hamiltoniana é a combinação sequencial de operadores causais e anticausais nas equações de movimento. Para tentar contornar essa situação, Klimek (2001) define o seguinte operador:

$$\mathbf{D}^\alpha = \frac{1}{2}({}_aD_t^\alpha + (-1)^{[\alpha]} {}_tD_b^\alpha). \quad (3.58)$$

Seja, então, uma Lagrangeana dependente de operadores sequenciais $(\mathbf{D}^\alpha)^i$ (\mathbf{D}^α aplicado i vezes) aplicados sobre as R coordenadas generalizadas do sistema $q_{0,1}, \dots, q_{0,R}$, e

$$q_{i,r} = (\mathbf{D}^\alpha)^i q_{0,r}, \quad (3.59)$$

com uma aplicação máxima de N vezes (implicando que $i = 1, \dots, N$). Nesse modelo, o expoente de derivação α é mantido fixo. Partindo da ação:

$$J = \int L(\{q_{0,r}, \dots, q_{N,r}\}_{r=1}^R, t) dt, \quad (3.60)$$

então, usando cálculo variacional, as seguintes equações de Euler-lagrange podem ser alcançadas (KLIMEK, 2001):

$$\frac{\partial L}{\partial q_{0,r}} + \sum_{i=1}^N (-1)^{i[\alpha]} (\mathbf{D}^\alpha)^i \frac{\partial L}{\partial q_{i,v}} = 0. \quad (3.61)$$

Entretanto, utiliza-se como base a seguinte regra de integração por partes (KLIMEK, 2001):

$$\int_a^b f(t) \mathbf{D}^\alpha [g(t)] dt = (-1)^{[\alpha]} \int_a^b \mathbf{D}^\alpha [f(t)] g(t) dt. \quad (3.62)$$

E essa equação não segue as integrações por partes (2.86) e (2.91). Logo, sua aplicação é limitada a funções $f(t)$ e $g(t)$ em que as derivadas de Riemann-Liouville e Caputo são iguais.

Klimek (2001) também define os momentos generalizados para o operador \mathbf{D}^α como:

$$p_{i,r} = \sum_{k=0}^{N-i-1} (-1)^{k[\alpha]} (\mathbf{D}^\alpha)^k \frac{\partial L}{\partial q_{k+i+1,r}}. \quad (3.63)$$

Como na mecânica hamiltoniana usual, a relação entre uma hamiltoniana e uma lagrangeana fracionária é dada por:

$$H = \sum_{i,r} p_{i,r} q_{i+1,r} - L, \quad (3.64)$$

com $i = 0, \dots, N-1$ e $r = 1, \dots, R$. Essa hamiltoniana é tal que:

$$H = H(\{p_{0,r}, \dots, p_{N-1,r}, q_{0,r}, \dots, q_{N-1,r}\}_{r=1}^R, t). \quad (3.65)$$

Para uma hamiltoniana fracionária com os operadores de Klimek (KLIMEK, 2001), com $i = 0, \dots, N-1$, as equações canônicas são:

$$\frac{\partial H}{\partial q_{i,r}} = (-1)^{[\alpha]} \mathbf{D}^\alpha p_{i,r}, \quad (3.66a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial p_{i,r}} = q_{i+1,r} = \mathbf{D}^\alpha q_{i,r}, \quad (3.66b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (3.66c)$$

Como exemplo de aplicação em um sistema sob potencial, seja $\alpha = \frac{1}{2}$. O subíndice r pode ser suprimido por trabalhar-se apenas com uma coordenada generalizada. Desta forma:

$$q_1 = \frac{1}{2}({}_a D_t^{1/2} + {}_t D_b^{1/2})q_0, \quad (3.67)$$

e

$$q_2 = \frac{1}{4}({}_a D_t^{1/2} + {}_t D_b^{1/2})^2 q_0. \quad (3.68)$$

Seja a energia cinética descrita na forma:

$$T = 2mq_2^2. \quad (3.69)$$

Seja também o "potencial dissipativo":

$$V_{diss}(q_1) = i\gamma q_1^2. \quad (3.70)$$

e um potencial geral qualquer $V(q_0)$. Logo, uma lagrangeana para esse tipo de sistema é dada por:

$$\begin{aligned} L(q_0, q_1, q_2) &= T - V_{diss}(q_1) - V(q_0) \\ &= 2mq_2^2 - i\gamma q_1^2 - V(q_0). \end{aligned} \quad (3.71)$$

Usando, então, a equação de Euler-Lagrange (3.61) para a lagrangeana da Equação (3.71), é possível chegar à seguinte equação de movimento:

$$\begin{aligned} -\frac{dV}{dq_0} + (\mathbf{D}^\alpha)(-2i\gamma q_1) + (\mathbf{D}^\alpha)^2(4mq_2) &= 0 \\ 4mq_4 - 2i\gamma q_2 - \frac{dV}{dq_0} &= 0. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Da mesma maneira que em outras abordagens, propõe-se fazer $b \rightarrow a^+$ para a composição de operadores e eliminação de anticausalidade (KLIMEK, 2001). Para o método, os operadores de derivação de Riemann-Liouville relacionam-se da forma ${}_t D_b^\alpha x = -i {}_a D_t^\alpha x$ para $b \rightarrow a^+$. Como consequência, a composição de operadores de derivação leva a:

$$\begin{aligned} (\mathbf{D}^\alpha)^2 &= \frac{1}{4}({}_a D_t^{1/2} + {}_t D_b^{1/2})({}_a D_t^{1/2} + {}_t D_b^{1/2}) \\ &= \frac{1}{4}[({}_a D_t^{1/2})^2 + ({}_t D_b^{1/2})^2 + {}_a D_t^{1/2} {}_t D_b^{1/2} + {}_t D_b^{1/2} {}_a D_t^{1/2}] \\ &= \frac{1}{4}[D - D - i({}_a D_t^{1/2})^2 - i({}_t D_b^{1/2})^2] \\ &= -\frac{2i}{4}D = -\frac{i}{2}D \end{aligned} \quad (3.73)$$

$$(\mathbf{D}^\alpha)^4 = \left(-\frac{i}{2}D\right)^2 = -\frac{1}{4}D^2, \quad (3.74)$$

caso as soluções respeitem à composição de lei de expoentes para derivação, ${}_a D_t^\alpha {}_a D_t^\beta f(t) = {}_a D_t^{\alpha+\beta} f(t)$. Logo, a Equação (3.72) se reduz a:

$$mD^2 q_0 + \gamma D q_0 + V'(q_0) = 0, \quad (3.75)$$

uma equação de movimento para q_0 com termo de dissipação proporcional à Dq_0 . Entretanto, esse procedimento leva a uma definição de energia cinética negativa, pois, para $b \rightarrow a^+$ e levando em conta a Equação (3.73):

$$T = 2mq_2^2 = -\frac{1}{2}mDq^2. \quad (3.76)$$

Para o exemplo em questão, utilizando a Equação (3.63) para os momentos generalizados, com $N = 2$:

$$p_1 = \frac{\partial L}{\partial q_{2,v}} = 4mq_2, \quad (3.77)$$

e

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{\partial L}{\partial q_{1,v}} + (\mathbf{D}^\alpha) \frac{\partial L}{\partial q_{2,v}} \\ &= 2i\gamma q_1 + (\mathbf{D}^\alpha)(4mq_2) \\ &= 2i\gamma q_1 + 4mq_3. \end{aligned} \quad (3.78)$$

Partindo agora para a expressão para a hamiltoniana desse sistema, usando a Equação (3.64) e a expressão da Equação (3.71) para a lagrangeana, chega-se a:

$$H(p_0, p_1, q_0, q_1) = \frac{1}{8m} p_1^2 + p_0 q_1 + i\gamma q_1^2 + V(q_0). \quad (3.79)$$

Usando então, as Equações (3.66a) e (3.66b), as equações de movimento para o sistema são:

$$\mathbf{D}^\alpha p_1 = p_0 + 2i\gamma q_1, \quad (3.80a)$$

$$\mathbf{D}^\alpha p_0 = V'(q_0), \quad (3.80b)$$

$$\mathbf{D}^\alpha q_1 = \frac{1}{4m} p_1, \quad (3.80c)$$

$$\mathbf{D}^\alpha q_0 = q_1. \quad (3.80d)$$

A última equação só oferece uma informação trivial por conta de essa relação já estar definida. Isolar p_1 na terceira equação, aplicar o operador \mathbf{D}^α na primeira e substituir na segunda leva ao retorno da equação de movimento (3.72).

A desvantagem do operador \mathbf{D}^α de Klimek nesse conjunto de equações é o prejuízo na integrabilidade analítica por conta de \mathbf{D}^α não possuir um operador inverso. E ainda, com fins de obtenção de integração numérica desse conjunto de equações, além da presença de quantidades complexas, \mathbf{D}^α depende tanto de ${}_a D_t^\alpha$ quanto de ${}_t D_b^\alpha$.

3.5 COMPARAÇÃO ENTRE ABORDAGENS ESTUDADAS

Dentre todas as dinâmicas apresentadas, apenas a abordagem de Klimek (2002) apresenta um conceito de energia cinética negativa no limite $b \rightarrow a^+$. Como não existem métodos para resolução de equações diferenciais fracionárias na combinação de operadores causais e anticausais em uma mesma variável, muitos deles apresentam a proposta de se fazer $b \rightarrow a^+$ para tornar possível a resolução de qualquer sistema que possa resultar das equações de movimento.

Entretanto, deve-se tomar cuidado na aplicação da lei de expoentes para a obtenção do termo dissipativo em Dq_0 por conta de essa não ser verdadeira para todos os casos. O formato das soluções deve ser verificado para avaliar se elas são compatíveis com a equação de movimento original. A Tabela 1 apresenta a condição de validade para os modelos propostos de acordo com a derivação sequencial apresentada em cada modelo.

Para que houvesse um termo dissipativo na equação de movimento, em todas as abordagens foi necessário o acréscimo de um termo proporcional ao quadrado da derivação

Tabela 1 – Comparação dos termos de derivação fracionária resultante dos modelos lagrangeano e hamiltoniano. Os autores com asterisco são os que tiveram seus modelos adaptados. Fonte: o autor.

Autor	Termo em Dq_0	Termo em D^2q_0
Agrawal, 2002	${}_aD_t^{1/2} {}_aD_t^{1/2} q_0(t) = Dq_0(t)$	Sem derivação sequencial
Muslih e Baleanu, 2005	$({}_aD_t^{1/2})^2 q_0(t) = Dq_0(t)$	$({}_aD_t^{1/2})^4 q_0(t) = D^2q_0(t)$
Agrawal*, 2007	${}_a^CD_t^{1/2} {}_aD_t^{1/2} q_0(t) = Dq_0(t)$	Sem derivação sequencial
Klimek, 2001	$\mathbf{D}^2q_0 = -\frac{i}{2}Dq_0$	$\mathbf{D}^4q_0 = -\frac{1}{4}D^2q_0$

fracionária de q_0 . Nesse termo, a presença do número imaginário i esteve presente para compensar o termo $(-i)$ consequente do processo de eliminação de anticausalidade, $b \rightarrow a^+$.

As definições de momento generalizado dos modelos essencialmente conservam a mesma forma. Naqueles em que a integração por partes das Equações (2.86) e (2.91) foi considerada, apareceram derivações de Caputo quando as coordenadas de posição eram escritas em termos da derivação de Riemann-Liouville e vice-versa.

4 DINÂMICA FRACIONÁRIA PARA UM BANHO TÉRMICO DISSIPATIVO

4.1 INTRODUÇÃO

Como aplicação de modelos de hamiltonianas dissipativas, foi escolhido o sistema sob banho térmico de partículas em interação de oscilação harmônica e dissipação. Há o interesse de generalizar o sistema (CORTÉS; WEST; LINDENBERG, 1985):

$$H = H_S(Q, P) + \sum_v \left(\frac{p_v^2}{2m_v} + \frac{m_v \omega_v^2}{2} q_v^2 \right) - \lambda Q G(q), \quad (4.1)$$

em que (Q, P) são as coordenadas do sistema, de hamiltoniana $H_S(Q, P)$ na ausência do banho térmico, com N partículas de banho térmico, e $v = 1, \dots, N$, de coordenadas (q_v, p_v) e massa m_v . O termo entre parênteses representa a hamiltoniana dessas partículas, cada uma sob um potencial do tipo oscilador harmônico simples de frequência ω_v . Sistema e banho são acoplados por meio do termo $-\lambda Q G(q)$, onde λ é uma constante de acoplamento e $G(q)$ é a função de acoplamento dependente das coordenadas q_v das partículas do banho.

A aplicação da teoria hamiltoniana de derivação inteira, no caso de um acoplamento linear $G = \sum_v \Gamma_v q_v$, Γ_v constantes, conduz às equações de movimento (CORTÉS; WEST; LINDENBERG, 1985):

$$\begin{aligned} q_v(t) - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q(t) &= \left(q_v(0) - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q(0) \right) \cos \omega_v t + \frac{p_v(0)}{m_v \omega_v} \sin \omega_v t - \\ &\quad - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \int_0^t \cos \omega_v(t - \tau) P(\tau) d\tau \end{aligned} \quad (4.2)$$

para as partículas do banho, e

$$DP(t) + \frac{\partial H_S^{(m)}}{\partial Q} + \lambda^2 \int_0^t K(t - \tau) P(\tau) d\tau = \lambda F(t) \quad (4.3)$$

para o sistema principal, chamada de **Equação de Langevin Generalizada**. Aqui, $q_v(0) = q_v(t=0)$, $p_v(0) = p_v(t=0)$, $Q(0) = Q(t=0)$ e $P(0) = P(t=0)$. $H_S^{(m)}$ é o sistema hamiltoniano modificado:

$$H_S^{(m)} = H_S(Q, P) - \lambda^2 \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{2m_v \omega_v^2} Q^2, \quad (4.4)$$

$K(t - \tau)$ é o **kernel** de memória dissipativo:

$$K(t - \tau) = \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{m_v \omega_v^2} \cos \omega_v(t - \tau), \quad (4.5)$$

e $F(t)$ é a **função de forçamento**:

$$F(t) = \sum_v \Gamma_v \left[\left(q_v(0) - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q(0) \right) \cos \omega_v t + \frac{P_v(0)}{m_v \omega_v} \sin \omega_v t \right]. \quad (4.6)$$

Considerando as partículas do banho térmico em equilíbrio termodinâmico no instante $t = 0$, define-se a densidade de probabilidade de tal forma que (CORTÉS; WEST; LINDENBERG, 1985):

$$\rho(q_v(0), p_v(0)) = \frac{1}{Z} \exp \left(-\frac{H_B^{(m)}}{kT} \right), \quad (4.7)$$

em que Z serve para normalizar a distribuição de forma que:

$$\int \rho \prod_v dq_v dp_v = 1, \quad (4.8)$$

e $H_B^{(m)}$ é a hamiltoniana do banho térmico:

$$H_B^{(m)} = \sum_v \left[\frac{p_v^2}{2m_v} + \frac{1}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_v - \lambda \frac{\Gamma_v Q}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \right]. \quad (4.9)$$

Desta forma,

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (4.10)$$

e:

$$\langle F(t) F(\tau) \rangle = kT \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{m_v \omega_v^2} \cos \omega_v (t - \tau), \quad (4.11)$$

em que T é a temperatura absoluta do sistema e k é a constante de Boltzmann.

A comparação entre as Equações (4.5) e (4.11) leva ao **Teorema de Flutuação-Dissipação de Kubo** (KUBO, 1966):

$$\langle F(t) F(\tau) \rangle = kTK(t - \tau), \quad (4.12)$$

relacionando a flutuação do termo de forçamento (vindo de uma interação linear entre as partículas do banho com o sistema) ao kernel de memória dissipativo da equação de Langevin.

4.2 ESCOLHA DO MODELO

Para a escolha adequada do modelo a utilizar para o banho térmico fracionário, faz-se necessário verificar se as soluções das equações de movimento fracionárias são compatíveis com a Equação (3.21) para um potencial harmônico simples. Seja o potencial:

$$V(q_0) = \frac{1}{2} m \omega^2 q_0^2, \quad (4.13)$$

onde ω é a frequência natural de oscilação desse potencial harmônico. A equação de movimento desejada deve ser:

$$mD^2q_0 + \gamma Dq_0 + m\omega^2q_0 = 0. \quad (4.14)$$

Essa equação diferencial é linear, e, logo, possui soluções da forma e^{rt} . Com $a = 0$, a derivada de Riemann-Liouville de ordem $\alpha = 1/2$ dessa função é, pela Equação (2.51):

$${}_0D_t^{1/2}[e^{rt}] = E_t\left(-\frac{1}{2}, r\right), \quad (4.15a)$$

e a derivada de Caputo de ordem $\alpha = 1/2$ no intervalo $[0, t]$ dessa função é, pela Equação (2.75):

$${}_0^CD_t^{1/2}[e^{rt}] = rE_t\left(\frac{1}{2}, r\right). \quad (4.15b)$$

Testando então derivações sequenciais distintas:

$${}_0D_t^{1/2}[{}_0D_t^{1/2}[e^{rt}]] = {}_0D_t^{1/2}\left[E_t\left(-\frac{1}{2}, r\right)\right] = E_t(-1, r)$$

pela Equação (2.55), válida pois $-\frac{1}{2} > -1$. Usando a propriedade da Equação (A.14b), $E_t(-1, r) = re^{rt}$, e:

$${}_0D_t^{1/2}[{}_0D_t^{1/2}[e^{rt}]] = re^{rt} = D[e^{rt}]. \quad (4.16a)$$

Logo, a lei de expoentes ${}_0D_t^{1/2}{}_0D_t^{1/2} = D$ vale para e^{rt} .

Aplicando ${}_0D_t^{1/2}$ à Equação (4.15b):

$${}_0D_t^{1/2}[{}_0^CD_t^{1/2}[e^{rt}]] = r{}_0D_t^{1/2}\left[E_t\left(\frac{1}{2}, r\right)\right].$$

Usando a Equação (2.55), válida porque $\frac{1}{2} > -1$:

$${}_0D_t^{1/2}[{}_0^CD_t^{1/2}[e^{rt}]] = rE_t(0, r) = re^{rt} = D[e^{rt}]. \quad (4.16b)$$

Logo, a lei de expoentes ${}_0D_t^{1/2}{}_0^CD_t^{1/2} = D$ é válida para e^{rt} .

Calculando ${}_0^CD_t^{1/2}[{}_0D_t^{1/2}[e^{rt}]]$:

$${}_0^CD_t^{1/2}[{}_0D_t^{1/2}[e^{rt}]] = {}_0^CD_t^{1/2}\left[E_t\left(-\frac{1}{2}, r\right)\right],$$

pela Equação (4.15a). Porém, a derivação de Caputo de $E_t\left(-\frac{1}{2}, r\right)$ não existe, pois $-\frac{1}{2} < 0$ (Equação (2.76)). Logo, ${}_0^CD_t^{1/2}{}_0D_t^{1/2} = D$ não é válida para e^{rt} .

E, por último:

$${}_0^CD_t^{1/2}[{}_0^CD_t^{1/2}[e^{rt}]] = r{}_0^CD_t^{1/2}\left[E_t\left(\frac{1}{2}, r\right)\right],$$

pela Equação (4.15b). E como $\frac{1}{2} > 0$, pela Equação (2.76):

$${}_0^CD_t^{1/2}[{}_0^CD_t^{1/2}[e^{rt}]] = rE_t(0, r) = re^{rt} = D[e^{rt}]. \quad (4.16c)$$

Logo, a lei de expoentes ${}_0^C D_t^{1/2} {}_0^C D_t^{1/2} = D$ é válida para e^{rt} . Por conta disso, a definição de coordenada generalizada baseada na derivação de Caputo é a mais adequada por conta de a sucessão de operadores ${}_0 D_t^{1/2} {}_0^C D_t^{1/2} = D$. Assim, evita-se uma definição que possibilita a não-existência da sucessão ${}_0^C D_t^{1/2} {}_0 D_t^{1/2}$ de derivações. Ao mesmo tempo, as formulas de integração por partes corretas são levadas em consideração.

Além da última consideração, nesse trabalho, foram considerados os fatores:

- A escolha de abordagens de mecânica que levem em conta as fórmulas corretas de integração por partes é preferível, então os modelos de Agrawal (2002), Riewe (1997) e qualquer um que adote exclusivamente derivação de Caputo são descartados.
- Abordagens baseadas em derivação sequencial são uma possibilidade, porém as condições de integração por partes, Equações (3.35) e (3.39), são mais complexas do que em abordagens usuais.
- E, por último, a abordagem de Klimek (2002) apresenta uma energia cinética negativa, além de a integração por partes não levar em conta a Equação (2.86).

Portanto, a abordagem mecânica de Agrawal (2007) foi selecionada para essa proposta.

4.3 BANHO TÉRMICO DISSIPATIVO - CASO SOBREAMORTECIDO

Propõe-se um sistema unidimensional com coordenadas Q e P para um corpo de massa unitária, acoplado com N partículas de massa m_v e coordenadas $(q_{n,v,a})$ tais que $q_{n,v,a} = {}_a^C D_t^{\alpha_n} q_{0,v}$. São usados $\alpha_1 = \frac{1}{2}$ e $\alpha_2 = 1$ para a obtenção de equações de movimento com dissipação linear proporcional à velocidade. Por simplicidade, faz-se $a = 0$ e adota-se a notação $q_{n,v,a} = q_{n,v}$ e $p_{n,v,a} = p_{n,v}$ para a v -ésima partícula. Os valores $q_{n,v,b}$ são desconsiderados por não contribuírem para o estudo, e $p_{n,v,b} = 0$, pela forma da hamiltoniana escolhida.

Usa-se um fator de acoplamento $-\lambda QG(q_{0,1}, \dots, q_{0,N})$. Idealiza-se um sistema central interagindo diretamente com uma quantidade de partículas vizinhas, as quais perdem energia para o meio exterior. Logo, a proposta de hamiltoniana para um sistema principal acoplado com N partículas de banho térmico sob dissipação sobrearmortecida é dada por:

$$H = H_S(Q, P) + \sum_v \left[\frac{1}{2m_v} (p_{1,v})^2 + p_{0,v} q_{1,v} + \frac{1}{2} i \gamma_v (q_{1,v})^2 + \frac{1}{2} m_v \omega_v^2 (q_{0,v})^2 \right] - \lambda QG(q_{0,1}, \dots, q_{0,N}), \quad (4.17)$$

com $p_{0,v} = -i\gamma_v q_{1,v} + m_v {}_tD_b^{1/2} q_{2,v}$ e $p_{1,v} = m_v q_{2,v}$. O acoplamento G será linear, do tipo:

$$G = \sum_{v=1}^N \Gamma_v q_{0,v}, \quad (4.18)$$

com Γ_v constantes (não relacionadas com a função gama definida no Capítulo 2).

Logo, as equações canônicas para as partículas do banho térmico são, ao usar as Equações (4.17), (3.66a) e (3.66b):

$${}_tD_b^{1/2} p_{0,v} = m_v \omega_v^2 q_{0,v} - \lambda Q \Gamma_v, \quad (4.19a)$$

$${}_tD_b^{1/2} p_{1,v} = p_{0,v} + i\gamma_v q_{1,v}, \quad (4.19b)$$

$${}_aD_t^{1/2} q_{0,v} = q_{1,v}, \quad (4.19c)$$

$$q_{2,v} = \frac{1}{2m_v} p_{1,v}. \quad (4.19d)$$

Pela hamiltoniana H conter termos de derivação de ordem inteira, para as coordenadas (Q, P) , as equações canônicas são as usuais (GOLDSTEIN; POOLE; SAFKO, 2002):

$$\frac{\partial H}{\partial Q} = -DP, \quad (4.20a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial P} = DQ. \quad (4.20b)$$

A substituição de $p_{0,v}$ na Equação (4.19a) leva a:

$$m_v D^2 q_{0,v} + i\gamma_v {}_tD_b^{1/2} q_{1,v} + m_v \omega_v^2 q_{0,v} = \lambda \Gamma_v Q. \quad (4.21)$$

Com $b \rightarrow a^+$, $a = 0$ e a aplicação de ${}_aD_t^{1/2} {}_aD_t^{1/2} q_0 = Dq_0$, essa equação é equivalente, portanto, a:

$$m_v D^2 q_{0,v} + \gamma_v Dq_{0,v} + m_v \omega_v^2 q_{0,v} = \lambda \Gamma_v Q. \quad (4.22)$$

4.3.1 Equações de movimento de $q_{0,v}$ e Q para o caso sobrearmortecido

Suponha regime sobrearmortecido $\left(\omega_v < \frac{\gamma_v}{2m_v}\right)$ para todas as partículas do banho. Então, a solução para a parte homogênea da Equação (4.22) é dada por:

$$q_{0,v,H}(t) = e^{-(\gamma_v/2m_v)t} (C_1 \cosh \Omega_v t + C_2 \sinh \Omega_v t), \quad (4.23)$$

(o subíndice H para representar a parte homogênea da solução), com

$$\Omega_v = \sqrt{\left(\frac{\gamma_v}{2m_v}\right)^2 - \omega_v^2}. \quad (4.24)$$

Sejam as condições iniciais $q_{0,v}(0) = q_v(0)$ e $Dq_{0,v}(0) = \frac{p_v(0)}{m_v}$. As constantes se tornam, nesse caso:

$$q_v(0) = e^0(C_1 \cosh 0 + C_2 \sinh 0) \Rightarrow C_1 = q_v(0), \quad (4.25)$$

e, quanto a C_2 , derivando a Equação (4.23):

$$Dq_{v,0,H}(t) = e^{-\gamma_v t/2m_v} \left[\left(\Omega_v C_2 - \frac{\gamma_v q_v(0)}{2m_v} \right) \cosh \Omega_v t + \left(\Omega_v q_v(0) - \frac{\gamma_v C_2}{2m_v} \right) \sinh \Omega_v t \right]. \quad (4.26)$$

Logo, avaliando $Dq_{v,0,H}$ em $t = 0$:

$$\begin{aligned} e^0 \left[\left(\Omega_v C_2 - \frac{\gamma_v q_v(0)}{2m_v} \right) \cosh 0 + \left(\Omega_v q_v(0) - \frac{\gamma_v C_2}{2m_v} \right) \sinh 0 \right] &= \frac{p_v(0)}{m_v}, \\ \Rightarrow \left(\Omega_v C_2 - \frac{\gamma_v q_v(0)}{2m_v} \right) &= \frac{p_v(0)}{m_v}, \\ \Rightarrow C_2 &= \frac{2p_v(0) + \gamma_v q_v(0)}{2m_v \Omega_v}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Logo, a Equação (4.23) transforma-se em:

$$q_{0,v,H}(t) = q_v(0)e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh \Omega_v t + \left(\frac{2p_v(0) + \gamma_v q_v(0)}{2m_v \Omega_v} \right) e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh \Omega_v t. \quad (4.28)$$

Para a parte não-homogênea da Equação (4.22), para acoplamento bilinear, usa-se a técnica de variação de parâmetros (ZILL; CULLEN, 2009). Seja:

$$q_{0,v,P} = u_1(t)e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh \Omega_v t + u_2(t)e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh \Omega_v t, \quad (4.29)$$

com o subíndice P sendo usado para representar que se trata da parte particular da solução. O cálculo do wronskiano da Equação (4.22) fornece:

$$W = \Omega_v e^{-(\gamma_v/m_v)t}. \quad (4.30)$$

Logo, os termos de variação de parâmetros são:

$$\begin{aligned} u_1'(t) &= \frac{1}{W(t)} \begin{vmatrix} 0 & e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh \Omega_v t \\ \frac{\lambda Q \Gamma_v}{m_v} & e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \left(-\frac{\gamma_v}{2m_v} \sinh \Omega_v t + \Omega_v \cosh \Omega_v t \right) \end{vmatrix} \\ u_1(t) &= -\frac{\lambda}{m_v \Omega_v} \int_0^t e^{(\gamma_v/2m_v)\tau} \sinh(\Omega_v \tau) Q \Gamma_v d\tau, \end{aligned} \quad (4.31)$$

e:

$$\begin{aligned} u'_2(t) &= \frac{1}{W(t)} \left| \begin{array}{cc} e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh \Omega_v t & 0 \\ e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \left(-\frac{\gamma_v}{2m_v} \cosh \Omega_v t + \Omega_v \sinh \Omega_v t \right) & \frac{\lambda Q \Gamma_v}{m_v} \end{array} \right| \\ u_2(t) &= \frac{\lambda}{m_v \Omega_v} \int_0^t e^{(\gamma_v/2m_v)\tau} \cosh(\Omega_v \tau) Q(\tau) \Gamma_v d\tau. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Portanto, a substituição de $u_1(t)$ e $u_2(t)$ na Equação (4.29) leva à seguinte parte da solução não-homogênea da Equação (4.22):

$$q_{0,v,P} = \frac{\lambda}{m_v \Omega_v} \int_0^t e^{-(\gamma_v/2m_v)(t-\tau)} \sinh[\Omega_v(t-\tau)] Q(\tau) \Gamma_v d\tau. \quad (4.33)$$

A combinação das Equações (4.28) e (4.33) leva a:

$$\begin{aligned} q_{0,v}(t) &= q_v(0) e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh \Omega_v t + \left(\frac{2p_v(0) + \gamma_v q_v(0)}{2m_v \Omega_v} \right) e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh \Omega_v t \\ &\quad + \frac{\lambda}{m_v \Omega_v} \int_0^t e^{-(\gamma_v/2m_v)(t-\tau)} \sinh[\Omega_v(t-\tau)] Q(\tau) \Gamma_v d\tau. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Logo, pelo uso de integração por partes e estabelecendo $P(t) = DQ(t)$, o resultado que se segue é:

$$\begin{aligned} q_{0,v}(t) - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q(t) &= \left[q_v(0) - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh(\Omega_v t) + \\ &\quad + \left[\frac{2p_v(0) + \gamma_v q_v(0)}{2m_v \Omega_v} - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh(\Omega_v t) + \\ &\quad - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \int_0^t e^{-(\gamma_v/2m_v)(t-\tau)} \{ \cosh[\Omega_v(t-\tau)] + \\ &\quad + \left(\frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \right) \sinh[\Omega_v(t-\tau)] \} P(\tau) d\tau, \end{aligned} \quad (4.35)$$

com $Q_0 = Q(0)$.

Agora, a substituição da hamiltoniana na Equação (4.17) na Equação (4.20a) leva a:

$$-DP = \frac{\partial H_S}{\partial Q} - \lambda \sum_v \Gamma_v q_{0,v}. \quad (4.36)$$

A Equação (4.35) pode ser usada na Equação (4.36), porém, os resultados são bastante extensos. Para simplificação de forma, se fizermos:

$$K(t-\tau) = \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{m_v \omega_v^2} e^{-(\gamma_v/2m_v)(t-\tau)} \left[\cosh[\Omega_v(t-\tau)] + \left(\frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \right) \sinh[\Omega_v(t-\tau)] \right] \quad (4.37a)$$

para o **kernel** dissipativo,

$$F(t) = \sum_v \left\{ \Gamma_v \left[q_v(0) - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh(\Omega_v t) + \right. \\ \left. + \Gamma_v \left[\frac{2p_v(0) + \gamma_v q_v(0)}{2m_v \Omega_v} - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh(\Omega_v t) \right\} \quad (4.37b)$$

para a **função de forçamento**, e

$$H_S^{(m)}(Q, P) = H_S(Q, P) - \lambda^2 Q^2 \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{2m_v \omega_v^2} \quad (4.37c)$$

para a hamiltoniana modificada do sistema, é obtida a equação de Langevin generalizada:

$$DP + \frac{\partial H_S^{(m)}}{\partial Q} = -\lambda^2 \int_0^t K(t - \tau) P(\tau) d\tau + \lambda F(t). \quad (4.38)$$

Essa expressão tem a mesma forma que o resultado de Cortés, West e Lindenberg (1985).

A análise da equação (4.37a) revela que, para cada parcela da soma de $K(t - \tau)$, há um decréscimo do tipo exponencial para trás no tempo na variável τ . Em outras palavras, a memória apresentada na integral da Equação (4.38) favorece a contribuição dos momentos $P(t)$ nas proximidades do instante atual. A influência de valores de momentos passados decai exponencialmente com o tempo.

4.3.2 Função partição e mecânica estatística

Suponha um espaço de fase estendido, com integração sobre todas as variáveis $q_{0,v}$, $q_{1,v}$, $p_{0,v}$ e $p_{1,v}$ no instante inicial. Logo, uma definição possível para a função partição em uma distribuição canônica seria:

$$Z = \int \exp(-\beta H) \prod_{v=1}^N dq_{0,v} dq_{1,v} dp_{0,v} dp_{1,v}, \quad (4.39)$$

com o significado de β ainda indeterminado. Análises mais profundas a respeito são necessárias.

Levando em conta a parcela da hamiltoniana com as variáveis das partículas do banho:

$$H_B = \sum_{v=1}^N \left[\frac{1}{2m_v} p_{1,v}^2 + \frac{1}{2} i \gamma_v q_{1,v}^2 + p_{0,v} q_{1,v} + \frac{1}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 - \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v} \right], \quad (4.40)$$

cada parcela pode ser evidenciada da seguinte forma:

$$h_v = \frac{1}{2m_v} p_{1,v}^2 + p_{0,v} q_{1,v} + \frac{1}{2} i \gamma_v q_{1,v}^2 + \frac{1}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 - \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v}. \quad (4.41)$$

Dessa forma, a função distribuição para o sistema pode ser definida como:

$$\rho = Z^{-1} \exp(-\beta H_B) = Z^{-1} \exp\left(-\beta \sum_{v=1}^N h_v\right) = Z^{-1} \prod_{v=1}^N \exp(-\beta h_v). \quad (4.42)$$

Como consequência, pela Equação (4.39):

$$\int \rho \prod_{v=1}^N dq_{0,v} dq_{1,v} dp_{0,v} dp_{1,v} = 1. \quad (4.43)$$

A função partição para a hamiltoniana (4.40) é calculada no Apêndice B:

$$Z = \left(\frac{4\pi^2}{i\beta^2} \right)^N \prod_{v=1}^N \frac{1}{\omega_v} \exp \left(\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2m_v \omega_v^2} \right). \quad (4.44)$$

Considerando uma média sobre todas as coordenadas $q_{0,v}$, $q_{1,v}$, $p_{0,v}$ and $p_{1,v}$ em $t = 0$, definimos:

$$\langle f(q_{0,v}, q_{1,v}, p_{0,v}, p_{1,v}, t) \rangle = \int f \rho \prod_w dq_{0,w} dq_{1,w} dp_{0,w} dp_{1,w}. \quad (4.45)$$

E ainda, por conta das características da função partição Z , é possível descrevê-lo como $Z = \prod_v Z_v$, no qual:

$$Z_v = \frac{4\pi^2}{i\omega_v \beta^2} \exp \left(\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2m_v \omega_v^2} \right). \quad (4.46)$$

Ainda, por conta da característica de produto das $4N$ variáveis $q_{0,v}$, $q_{1,v}$, $p_{0,v}$ e $p_{1,v}$ como diferenciais na Equação (4.45), é possível fazer a separação:

$$\rho = \prod_v \rho_v(q_{0,v}, q_{1,v}, p_{0,v}, p_{1,v}), \quad (4.47)$$

em que

$$\rho_v = \frac{1}{Z_v} \exp(-\beta h_v). \quad (4.48)$$

Logo, se uma função f contiver variáveis apenas de índice v , estabelece-se que:

$$\begin{aligned} \langle f(q_{0,v}, q_{1,v}, p_{0,v}, p_{1,v}) \rangle &= \int f \rho_v dq_{0,v} dq_{1,v} dp_{0,v} dp_{1,v} \\ &\quad \prod_{w \neq v} \int \rho_w dq_{0,w} dq_{1,w} dp_{0,w} dp_{1,w}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Como:

$$Z_v = \int \exp(-\beta h_v) dq_{0,v} dq_{1,v} dp_{0,v} dp_{1,v}, \quad (4.50)$$

o produtório da Equação (4.49) é um produto de unidades, e:

$$\langle f(q_{0,v}, q_{1,v}, p_{0,v}, p_{1,v}) \rangle = \int f \rho_v dq_{0,v} dq_{1,v} dp_{0,v} dp_{1,v}. \quad (4.51)$$

Ainda, se f for um produto de $N' \leq N$ funções tais que $f = \prod_v f_v$ e $f_v = f_v(q_{0,v}, q_{1,v}, p_{0,v}, p_{1,v})$, demonstra-se, de modo semelhante:

$$\langle f \rangle = \prod_v \int f_v \rho_v dq_{0,v} dq_{1,v} dp_{0,v} dp_{1,v}. \quad (4.52)$$

4.3.3 Distribuição estatística de $q_{0,v}$ e $p_{1,v}$ no instante $t = 0$ e limite $b \rightarrow a^+$

Usando as definições de função partição generalizada e distribuição canônica da sessão prévia, é possível determinar as médias estatísticas para $q_{0,v}$ e $p_{1,v}$ no instante $t = 0$. Do Apêndice B:

$$\langle q_{0,v} \rangle = \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2}, \quad (4.53)$$

$$\langle p_{1,v} \rangle = 0. \quad (4.54)$$

E também, no Apêndice B:

$$\langle q_{0,v}^2 \rangle = \frac{1}{\beta m_v \omega_v^2} + \frac{\lambda^2 Q_0^2 \Gamma_v^2}{m_v^2 \omega_v^4} \quad (4.55)$$

e

$$\langle p_{1,v}^2 \rangle = \frac{m_v}{\beta}. \quad (4.56)$$

Com isso, o desvio padrão dessas quantidades pode ser determinado:

$$\sigma_{q0} = \sqrt{\frac{1}{m_v \omega_v^2}} \quad (4.57)$$

e

$$\sigma_{p1} = \sqrt{\frac{m_v}{\beta}}. \quad (4.58)$$

4.3.4 Cálculo do valor esperado de H_B para $t = 0$

Da definição de valor esperado, Equação (4.45), a expressão para o valor esperado de H no instante $t = 0$ é dada por:

$$\langle H_B \rangle = \frac{1}{Z} \int H \exp(-\beta H_B) \prod_w dq_{0,w} dq_{1,w} dp_{0,w} dp_{1,w}. \quad (4.59)$$

Entretanto, $H_B \exp(-\beta H_B) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \exp(-\beta H_B)$, e logo:

$$\langle H_B \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \int \exp(-\beta H_B) \prod_w dq_{0,w} dq_{1,w} dp_{0,w} dp_{1,w}. \quad (4.60)$$

Pela definição de Z , Equação (4.39):

$$\langle H_B \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z). \quad (4.61)$$

Portanto, substituindo o resultado de Z da Equação (4.44) em (4.61), é obtido o valor esperado de H para as partículas do banho térmico em $t = 0$:

$$\langle H_B \rangle = \frac{N}{\beta} - \lambda^2 Q_0^2 \sum_{v=1}^N \frac{\Gamma_v^2}{2m_v \omega_v^2}. \quad (4.62)$$

Esse valor esperado é constituído de duas contribuições. A primeira vem da energia das partículas do banho, $\frac{N}{\beta}$. Ela corresponde ao dobro do que se espera para uma partícula livre que se move em uma dimensão, $\frac{1}{2}\frac{N}{\beta}$, se $\beta = 1/(kT)$. E a contribuição negativa vem da energia de ligação dessas partículas com a principal, e é proporcional a Q_0^2 . Não necessariamente $\langle H_B \rangle$ corresponde ao valor esperado de energia das N partículas do banho. Tal termo deve vir da forma adotada pela hamiltoniana, por conta do termo de força adicional:

$$F_{extra} = -\lambda^2 Q \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{m_v \omega_v^2}, \quad (4.63)$$

na Equação (4.38), presente na hamiltoniana modificada $H_S^{(m)}$ na forma de um potencial adicional centrado na partícula do sistema principal.

4.3.5 Evolução temporal estatística das quantidades $q_{0,v}(t)$ e $p_{1,v}(t)$ no limite local

Seja $\langle q_{0,v}(t) \rangle$ a média de $q_{0,v}$ dependente do tempo. Levando em consideração a Equação (4.35), a expressão para $\langle q_{0,v} \rangle$ inicia em:

$$\begin{aligned} \langle q_{0,v}(t) \rangle - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q(t) &= \left[\langle q_{0,v} \rangle - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh(\Omega_v t) + \\ &+ \left[\frac{2\langle p_{1,v} \rangle + \gamma_v \langle q_{0,v} \rangle}{2m_v \Omega_v} - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh(\Omega_v t) + \\ &- \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \int_0^t e^{-(\gamma_v/2m_v \Omega_v)(t-\tau)} \{ \cosh[\Omega_v(t-\tau)] + \\ &+ \left(\frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \right) \sinh[\Omega_v(t-\tau)] \} P(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Levando em consideração que a integral dessa expressão é simétrica e é possível fazer a substituição $\tau \rightarrow t - \tau$, e também os valores das Equações (4.53) e (4.54):

$$\langle q_{0,v}(t) \rangle = \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q(t) - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \int_0^t e^{-(\gamma_v/2m_v)\tau} \left(\cosh \Omega_v \tau + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \sinh \Omega_v \tau \right) P(t - \tau) d\tau. \quad (4.65)$$

Essa expressão permanece mesmo para tempos t muito longos. Deve-se notar que essa média leva em conta contribuições do momento P da partícula principal em todo o intervalo $[0, t]$, porém, essas contribuições diminuem exponencialmente conforme τ se afasta de t e se aproxima de zero. Ou seja, o momento $P(t)$ de instantes mais próximos de $t = \tau$ contribuem mais para a média de posição das partículas do que para valores mais afastados. Ainda, deve-se notar a relação de $\langle q_{0,v}(t) \rangle$ com a posição atual $Q(t)$ da partícula principal. E ainda, para um tempo t muito grande, as contribuições transientes de $q_{0,v}(t)$ da Equação (4.35) se tornam desprezíveis, e $q_{0,v}(t) \rightarrow \langle q_{0,v}(t) \rangle$.

Notando que o processo de média da Equação (4.45) não depende do tempo, e que $p_{1,v}(t) = m_v D q_{0,v}$, e definindo $\langle p_{1,v}(t) \rangle$ como a média temporal do momento das partículas do banho, é possível afirmar que:

$$\langle p_{1,v}(t) \rangle = m_v D \langle q_{0,v}(t) \rangle. \quad (4.66)$$

Logo, usando a Equação (4.65):

$$\begin{aligned} \langle p_{1,v} \rangle &= \frac{\lambda \Gamma_v}{\omega_v^2} P(t) - \frac{\lambda \Gamma_v}{\omega_v^2} P_0 e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \left(\cosh \Omega_v t + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \sinh \Omega_v t \right) \\ &\quad - \frac{\lambda \Gamma_v}{\omega_v^2} \int_0^t e^{-(\gamma_v/2m_v)\tau} \left(\cosh \Omega_v \tau + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \sinh \Omega_v \tau \right) DP(t - \tau) d\tau. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Para um valor muito alto de t , o termo proporcional a P_0 se anula, e:

$$\langle p_{1,v}(t) \rangle \approx \frac{\lambda \Gamma_v}{\omega_v^2} P(t) - \frac{\lambda \Gamma_v}{\omega_v^2} \int_0^t e^{-(\gamma_v/2m_v)\tau} \left(\cosh \Omega_v \tau + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \sinh \Omega_v \tau \right) DP(t - \tau) d\tau. \quad (4.68)$$

Percebe-se que $\langle p_{1,v}(t) \rangle$ possui duas contribuições para $t \gg 0$. A primeira é proporcional ao momento $P(t)$ do sistema principal. A segunda é dependente de um *kernel* de memória com decaimento exponencial para $\tau < t$, com contribuições mais significantes de $\dot{P}(t)$ nas proximidades de $\tau = t$.

Comparando com o valor de $p_{1,v}(t)$:

$$\begin{aligned} p_{1,v}(t) &= m_v D q_{0,v}(t) \\ &= m_v \left(q_{0,v} - \frac{\lambda \Gamma_v Q_0}{m_v \omega_v^2} \right) e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \left(\Omega_v \sinh \Omega_v t - \frac{\gamma_v}{2m_v} \cosh \Omega_v t \right) + \\ &\quad + m_v \Omega_v \left(\frac{2p_{1,v} + \gamma_v q_{0,v}}{2m_v \Omega_v} - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 \right) e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \left(\cosh \Omega_v t - \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \sinh \Omega_v t \right) + \\ &\quad + \frac{\lambda \Gamma_v}{\omega_v^2} P(t) - \frac{\lambda \Gamma_v}{\omega_v^2} P_0 e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \left(\cosh \Omega_v t + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \sinh \Omega_v t \right) \\ &\quad - \frac{\lambda \Gamma_v}{\omega_v^2} \int_0^t e^{-(\gamma_v/2m_v)\tau} \left(\cosh \Omega_v \tau + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \sinh \Omega_v \tau \right) \dot{P}(t - \tau) d\tau, \end{aligned} \quad (4.69)$$

pode-se perceber que $p_{1,v}(t)$ e $\langle p_{1,v}(t) \rangle$ se aproximam para $t \gg 0$, por conta da anulação dos termos transientes.

4.3.6 Estudo da função de forçamento $F(t)$

Deseja-se analisar $F(t)$ tanto em relação a sua média quanto sua variância. É utilizada uma distribuição canônica para coordenadas e momentos generalizados em $t = 0$

e um alto número N de partículas. O objetivo é determinar valores médios para $F(t)$ e $F(t)F(\tau)$, com $F(t)$ sendo:

$$F(t) = \sum_v \Gamma_v \left\{ \left[q_v(0) - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh(\Omega_v t) + \right. \\ \left. + \left[\frac{2p_v(0) + \gamma_v q_v(0)}{2m_v \Omega_v} - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh(\Omega_v t) \right\} = \sum_v \Gamma_v f_v. \quad (4.70)$$

Como a média da Equação (4.45) envolve integração, essa operação é linear, e, logo:

$$\langle F(t) \rangle = \sum_v \Gamma_v \left\{ \left[\langle q_{0,v} \rangle - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh(\Omega_v t) + \right. \\ \left. + \left[\frac{2\langle p_{1,v} \rangle + \gamma_v \langle q_{0,v} \rangle}{2m_v \Omega_v} - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh(\Omega_v t) \right\}, \quad (4.71)$$

com as correspondências $q_v(0) \rightarrow q_{0,v}$ e $p_v(0) \rightarrow p_{1,v}$. Levando em conta os resultados das Equações (4.53) e (4.54), conclui-se que $\langle F(t) \rangle = 0$ (Apêndice B).

Quanto à segunda média:

$$\langle F(t)F(\tau) \rangle = \sum_{u,v} \Gamma_u \Gamma_v \left\{ \langle F_1 \rangle e^{-(\gamma_u/2m_u)t} e^{-(\gamma_v/2m_v)\tau} \cosh(\Omega_u t) \cosh(\Omega_v \tau) \right. \\ + \langle F_2 \rangle e^{-(\gamma_u/2m_u)t} e^{-(\gamma_v/2m_v)\tau} \cosh(\Omega_u t) \sinh(\Omega_v \tau) \\ + \langle F_3 \rangle e^{-(\gamma_u/2m_u)t} e^{-(\gamma_v/2m_v)\tau} \sinh(\Omega_u t) \cosh(\Omega_v \tau) \\ \left. + \langle F_4 \rangle e^{-(\gamma_u/2m_u)t} e^{-(\gamma_v/2m_v)\tau} \sinh(\Omega_u t) \sinh(\Omega_v \tau), \right. \quad (4.72)$$

com:

$$F_1 = \left[q_{0,u} q_{0,v} - \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} Q_0 q_{0,v} - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 q_{0,u} + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} Q_0^2 \right], \quad (4.73a)$$

$$F_2 = \left[\frac{1}{m_v \Omega_v} q_{0,u} p_{1,v} + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} q_{0,u} q_{0,v} - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 q_{0,u} - \right. \\ \left. - \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} \left(\frac{2p_{1,v} + \gamma_v q_{0,v}}{2m_v \Omega_v} \right) Q_0 + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v \gamma_v}{2m_u m_v^2 \omega_u^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0^2 \right], \quad (4.73b)$$

$$F_3 = \left[\frac{1}{m_u \Omega_u} p_{1,u} q_{0,v} + \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} q_{0,u} q_{0,v} - \frac{\lambda \Gamma_u \gamma_u}{2m_u^2 \omega_u^2 \Omega_u} q_{0,v} Q_0 - \right. \\ \left. - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \left(\frac{2p_{1,u} + \gamma_u q_{0,u}}{2m_u \Omega_u} \right) Q_0 + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v \gamma_u}{2m_v m_u^2 \omega_u^2 \omega_v^2 \Omega_u} Q_0^2 \right], \quad (4.73c)$$

e

$$\begin{aligned}
F_4 = & \left[\frac{1}{m_u m_v \Omega_u \Omega_v} p_{1,u} p_{1,v} + \frac{1}{m_u \Omega_u} \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} p_{1,u} q_{0,v} - \right. \\
& - \frac{1}{m_u \Omega_u} \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} p_{1,u} Q_0 + \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \frac{1}{m_v \Omega_v} q_{0,u} p_{1,v} + \\
& + \frac{\gamma_u \gamma_v}{4m_u m_v \Omega_u \Omega_v} q_{0,u} q_{0,v} - \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} q_{0,u} Q_0 + \\
& \left. + \frac{\lambda \Gamma_u \gamma_u}{2m_u^2 \omega_u^2 \Omega_u} \left(\frac{2p_{1,v} + \gamma_v q_{0,v}}{2m_v \Omega_v} \right) Q_0 - \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v \gamma_u \gamma_v}{4m_u^2 m_v^2 \omega_u^2 \omega_v^2 \Omega_u \Omega_v} Q_0^2 \right] \}.
\end{aligned} \tag{4.73d}$$

As quantidades $\langle F_1 \rangle$, $\langle F_2 \rangle$, $\langle F_3 \rangle$ e $\langle F_4 \rangle$, calculadas no Apêndice B, são:

$$\langle F_1 \rangle = \delta_{uv} \frac{1}{\beta m_v \omega_v^2}, \tag{4.74a}$$

$$\langle F_2 \rangle = \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \frac{\delta_{uv}}{\beta m_v \omega_v^2}, \tag{4.74b}$$

$$\langle F_3 \rangle = \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \frac{\delta_{uv}}{2m_v \omega_v^2}, \tag{4.74c}$$

e

$$\langle F_4 \rangle = \delta_{uv} \left(\frac{m_v}{\beta} \frac{1}{m_u m_v \Omega_u \Omega_v} + \frac{1}{\beta m_v \omega_v^2} \frac{\gamma_u \gamma_v}{4m_u m_v \Omega_u \Omega_v} \right). \tag{4.74d}$$

Logo, substituindo esses valores na Equação (4.72) e reorganizando os termos (Apêndice B):

$$\begin{aligned}
\langle F(t)F(\tau) \rangle = & \frac{1}{\beta} \sum_v \left\{ \frac{\Gamma_v^2}{m_v \omega_v^2} e^{-(\gamma_v/2m_v)(t+\tau)} \left[\cosh(\Omega_v t) + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \sinh(\Omega_v t) \right] \right. \\
& \left[\cosh(\Omega_v \tau) + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \sinh(\Omega_v \tau) \right] \Big\} + \\
& + \frac{1}{\beta} \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{m_v \Omega_v^2} e^{-(\gamma_v/2m_v)(t+\tau)} \sinh(\Omega_v t) \sinh(\Omega_v \tau).
\end{aligned} \tag{4.75}$$

As médias $\langle F(t) \rangle$ e $\langle F(t)F(\tau) \rangle$ aqui obtidas mantêm similaridades com as Equações (4.10) e (4.11) do sistema sem dissipação. A busca de uma correspondência entre $\langle F(t) \rangle$ de ambos os modelos pode ser considerada no caso subamortecido, discutido na seção seguinte.

4.4 BANHO TÉRMICO DISSIPATIVO - CASO SUBAMORTECIDO

Para desenvolver as equações de movimento do sistema e das partículas do banho para o caso subamortecido $\omega_v < \frac{\gamma_v}{2m_v}$, não é necessário desenvolver todos os cálculos

novamente. Fazendo $\Omega_v^* = i\Omega_v$, com

$$\Omega_v^* = \sqrt{\omega_v^2 - \left(\frac{\gamma_v}{2m_v}\right)^2}, \quad (4.76)$$

da Análise Complexa, sabe-se que (ZILL; CULLEN, 2009):

$$\begin{aligned} \sinh iz &= i \sin z, \\ \cosh iz &= \cos z. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Logo, as equações de movimento das partículas do banho se tornam:

$$\begin{aligned} q_{0,v}(t) - \frac{\lambda\Gamma_v}{m_v\omega_v^2}Q(t) &= \left[q_v(0) - \frac{\lambda\Gamma_v}{m_v\omega_v^2}Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cos(\Omega_v^*t) + \\ &+ \left[\frac{2p_v(0) + \gamma_v q_v(0)}{2m_v\Omega_v^*} - \frac{\lambda\Gamma_v\gamma_v}{2m_v^2\omega_v^2\Omega_v^*}Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sin(\Omega_v^*t) + \\ &- \frac{\lambda\Gamma_v}{m_v\omega_v^2} \int_0^t e^{-(\gamma_v/2m_v\Omega_v^*)(t-\tau)} \{ \cos[\Omega_v^*(t-\tau)] + \\ &+ \left(\frac{\gamma_v}{2m_v\Omega_v^*} \right) \sin[\Omega_v^*(t-\tau)] \} P(\tau) d\tau, \end{aligned} \quad (4.78)$$

e, para a Equação de Langevin (4.38), o *kernel* dissipativo se torna:

$$K(t-\tau) = \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{m_v\omega_v^2} e^{-(\gamma_v/2m_v)(t-\tau)} \left[\cos[\Omega_v^*(t-\tau)] + \left(\frac{\gamma_v}{2m_v\Omega_v^*} \right) \sin[\Omega_v^*(t-\tau)] \right], \quad (4.79)$$

e também, para a função de forçamento:

$$\begin{aligned} F(t) &= \sum_v \left\{ \Gamma_v \left[q_v(0) - \frac{\lambda\Gamma_v}{m_v\omega_v^2}Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cos(\Omega_v^*t) + \right. \\ &\left. + \Gamma_v \left[\frac{2p_v(0) + \gamma_v q_v(0)}{2m_v\Omega_v^*} - \frac{\lambda\Gamma_v\gamma_v}{2m_v^2\omega_v^2\Omega_v^*}Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sin(\Omega_v^*t) \right\}. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Por consequência, mantendo a média estatística proposta, Equação (4.39), são obtidos $\langle F(t) \rangle = 0$ e:

$$\begin{aligned} \langle F(t)F(\tau) \rangle &= \frac{1}{\beta} \sum_v \left\{ \frac{\Gamma_v^2}{m_v\omega_v^2} e^{-(\gamma_v/2m_v)(t+\tau)} \left[\cos(\Omega_v^*t) + \frac{\gamma_v}{2m_v\Omega_v^*} \sin(\Omega_v^*t) \right] \right. \\ &\left[\cos(\Omega_v^*\tau) + \frac{\gamma_v}{2m_v\Omega_v^*} \sin(\Omega_v^*\tau) \right] \Big\} + \\ &+ \frac{1}{\beta} \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{m_v(\Omega_v^*)^2} e^{-(\gamma_v/2m_v)(t+\tau)} \sin(\Omega_v^*t) \sin(\Omega_v^*\tau). \end{aligned} \quad (4.81)$$

O *kernel* dissipativo adquire caráter oscilatório, com amplitude exponencialmente decrescente, nesse caso subamortecido. As oscilações de diferentes partículas podem sofrer interferências destrutivas e reduzir contribuições de efeitos distantes de $\tau = t$ com as distribuições apropriadas dos valores de acoplamento Γ_v . Para $\gamma_v \rightarrow 0$, todo esse conjunto de equações tende ao caso conservativo, Equações (4.2), (4.5), (4.6), (4.10) e (4.11).

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os desafios do Cálculo Fracionário consistem em operadores com propriedades não-triviais e não-intuitivas. A definição de integração fracionária acaba por ser fundamental para as definições de derivação, que surgem da combinação de uma derivação inteira com uma integral fracionária. Como essas operações não são comutativas, a ordem em que elas são aplicadas a uma função em geral importa.

Para este trabalho, foi necessário investigar as expressões de integração por partes para verificar sua veracidade e aplicabilidade em problemas físicos. No processo, além de o operador mudar entre causalidade e anticausalidade, conjuga-se também o tipo de derivação: entre as definições de Riemann-Liouville e Caputo. A última operação resulta em condições iniciais inteiras, algo desejável no estudo de sistemas dinâmicos, ao contrário da primeira, por essa levar a condições iniciais sob derivação fracionária.

Ainda, de modo geral, por mais que valha para a integração a combinação de expoentes $I^\alpha I^\beta = I^{\alpha+\beta}$, não se pode dizer o mesmo para a derivada fracionária para todos os tipos de função, sendo verdade apenas para um conjunto restrito de funções. Restrições para que isso aconteça estão relacionadas ao expoente mais baixo da singularidade da função em $x = a$ e sua possível anulação sob a aplicação do primeiro operador de derivação.

O estabelecimento dos fundamentos das mecânicas lagrangeana e hamiltoniana fracionária por Riewe nos anos 1990 abriu a possibilidade de estudar problemas com dissipação, demonstrado o fato de que H não é mais uma constante de movimento quando a derivação fracionária se mostra presente, como se pode ver na Equação (3.11). Entretanto, a obtenção de equações de Euler-Lagrange e equações canônicas de movimento dependem da conjugação dos termos de derivação de Riemann-Liouville e Caputo, considerado por autores posteriores a Riewe. Por consequência, ocorre a combinação de operadores causais e anticausais nas equações, fato em geral contornado por diversos autores pela operação $b \rightarrow a^+$. Nesse limite, existe inclusive a possibilidade de determinar soluções numéricas de acordo com o potencial escolhido.

Outra consideração sobre sistemas dinâmicos fracionários a realizar diz respeito à aplicação de operadores em sequência sobre as coordenadas generalizadas dos problemas em questão. Para a seleção adequada do modelo com as coordenadas generalizadas apropriadas, é necessário testar a validade da aplicação de operadores de derivação para as equações diferenciais estudadas, de acordo com a Tabela 1, página 57, verificando a lei de expoentes para as soluções analíticas, quando essas existem.

Nos trabalhos estudados, não há uma convenção sobre a notação utilizada. Existem

inclusive outras definições de derivação de Caputo, as quais devem ser usadas com o devido cuidado por não levar em consideração o fator $(-1)^{n+1}$.

O modelo de Agrawal (2007) e sua generalização foram escolhidas em função de sua adequação para equações diferenciais ordinárias lineares com sua versão fracionária. Funções descritíveis por série de Taylor não levam a singularidades de qualquer tipo quando uma derivação de Caputo de ordem $\frac{1}{2}$ lhe é aplicada, por conta de ${}_0^C D_t^\alpha(1) = 0$, para qualquer $\alpha > 0$. Por conta disso, as derivações sequenciais presentes nesse modelo são adequadas para funções exponenciais.

A hamiltoniana para uma partícula sob oscilação harmônica amortecida foi adaptada para o banho térmico dissipativo explorado no Capítulo 4. As soluções exponenciais foram testadas para derivações sequenciais diversas, o que levou à escolha do modelo de Agrawal com derivação de Caputo. Desse modo, médias estatísticas sobre condições iniciais puderam ser calculadas para posição e momento das partículas do banho, além de possibilitar o cálculo de $\langle F(t) \rangle$ e $\langle F(t)F(\tau) \rangle$. Não é possível estabelecer uma constante de difusão baseada em $\langle [F(t)]^2 \rangle$ como no caso conservativo, por conta de a dependência temporal de $\langle F(t)F(\tau) \rangle$ não ser eliminada para $t = \tau$ nas Equações (4.75) e (4.81).

Mesmo com a dissipação, a equação de Langevin generalizada mantém a mesma forma que no caso conservativo. Ainda, o termo integral da Equação (4.35), proveniente da resolução da equação diferencial pelo termo transiente, cumpre as condições de validade para leis de expoentes de derivação por conta de se anular em $t = 0$. Por conta de essa equação também depender de $Q(t)$, este também deve ser testado para derivação sequencial para que o modelo possa ser considerado válido.

Para modelos de teste numérico, distribuições de massa m_v e coeficientes de dissipação γ_v devem ser considerados. O estudo de hamiltonianas $H_S^{(m)}$ específicas dependem das mesmas. Logo, é esperado uma combinação dos casos sub e sobre-amortecido em simulações numéricas. Existem possibilidades variadas de trabalhos a desenvolver explorando a ideia de banho térmico dissipativo.

Apêndices

APÊNDICE A – Demonstrações de cálculo fracionário

A.1 Integral do tipo função beta envolvendo logaritmo

Deseja-se demonstrar a seguinte integral:

$$\int_0^1 u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1} \ln u \, du = B(\mu, \nu)[\psi(\mu) - \psi(\mu + \nu)], \quad (\text{A.1})$$

com $\mu, \nu > 0$, $B(\mu, \nu)$ a função beta e ψ a função digama. Do membro esquerdo dessa equação, percebe-se que:

$$u^{\mu-1} \ln u = \frac{\partial}{\partial \mu} u^{\mu-1}.$$

Logo:

$$\int_0^1 u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1} \ln u \, du = \int_0^1 \frac{\partial}{\partial \mu} (u^{\mu-1})(1-u)^{\nu-1} \, du.$$

Ainda, como o restante do integrando da integral do membro direito dessa equação independe de μ :

$$\int_0^1 u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1} \ln u \, du = \int_0^1 \frac{\partial}{\partial \mu} [u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1}] \, du.$$

Supondo que a integração convirja, os operadores de integração em u e de derivação em μ comutam, e logo, podem ser trocados de posição sem alteração do resultado. Logo:

$$\int_0^1 u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1} \ln u \, du = \frac{d}{d\mu} \int_0^1 u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1} \, du.$$

Reconhece-se no membro esquerdo a função beta (Equação (2.18a)). Usando o resultado da integração em termos das funções gama (Equação (2.17)):

$$\int_0^1 u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1} \ln u \, du = \frac{d}{d\mu} \left[\frac{\Gamma(\mu)\Gamma(\nu)}{\Gamma(\mu + \nu)} \right].$$

Aplicando, então, a derivação sobre o membro esquerdo:

$$\int_0^1 u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1} \ln u \, du = \Gamma(\nu) \left[\frac{1}{\Gamma(\mu + \nu)} \frac{d}{d\mu} \Gamma(\mu) - \frac{\Gamma(\mu)}{\Gamma(\mu + \nu)^2} \frac{d}{d\mu} \Gamma(\mu + \nu) \right].$$

Usando o resultado da derivação de uma função gama, Equação (2.16):

$$\int_0^1 u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1} \ln u \, du = \Gamma(\nu) \left[\frac{\Gamma(\mu)}{\Gamma(\mu + \nu)} \psi(\mu) - \frac{\Gamma(\mu)}{\Gamma(\mu + \nu)} \psi(\mu + \nu) \right].$$

Portanto, colocando em evidência a fração $\frac{\Gamma(\mu)}{\Gamma(\mu + \nu)}$ e usando novamente a definição da função beta (Equação (2.17)):

$$\int_0^1 u^{\mu-1}(1-u)^{\nu-1} \ln u \, du = B(\mu, \nu)[\psi(\mu) - \psi(\mu + \nu)],$$

como se desejava demonstrar.

A.2 Integral e derivada fracionária de Riemann-Liouville de uma função do tipo potência com intervalo de derivação genérico

Seja a função $f(x) = (x - c)^\lambda$ integrada numa região $[a, x]$, $a > c$. Para proceder com essa integração com os resultados já conhecidos, é necessário escrever $f(x)$ em série de $(x - a)$. Com isso:

$$(x - c)^\lambda = (a - c)^\lambda \left(1 + \frac{x - a}{a - c}\right)^\lambda,$$

logo, expandindo essa função em série de $x - a$, em torno de $x = a$:

$$(x - c)^\lambda = (a - c)^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{n! \Gamma(\lambda - n + 1)} \frac{(x - a)^n}{(a - c)^n}. \quad (\text{A.2})$$

Essa expressão é uniformemente convergente, e logo, a linearidade do operador ${}_a I_x^\alpha$ só pode ser usada nesse intervalo, resultando em:

$${}_a I_x^\alpha [(x - c)^\lambda] = (a - c)^\lambda \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\lambda + 1)}{n! \Gamma(\lambda - n + 1)} \frac{1}{(c - a)^n} {}_a I_x^\alpha [(x - a)^n].$$

Aplicando, então, o resultado da Equação (2.36) para integração de potências:

$${}_a I_x^\alpha [(x - c)^\lambda] = (a - c)^\lambda \Gamma(\lambda + 1) (x - a)^\alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(n - \alpha + 1) \Gamma(\lambda - n + 1)} \left(\frac{x - a}{c - a}\right)^n. \quad (\text{A.3})$$

Para a derivação, considerando convergência uniforme para a série da Equação (A.2):

$${}_a D_x^\alpha [(x - c)^\lambda] = (a - c)^\lambda \Gamma(\lambda + 1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! \Gamma(\lambda - n + 1)} \frac{1}{(c - a)^n} {}_a D_x^\alpha [(x - a)^n].$$

Usando o resultado da Equação (2.49) para essa série, o seguinte resultado é obtido:

$${}_a D_x^\alpha [(x - c)^\lambda] = (a - c)^\lambda \Gamma(\lambda + 1) (x - a)^{-\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma(n - \alpha + 1) \Gamma(\lambda - n + 1)} \left(\frac{x - a}{c - a}\right)^n,$$

como se desejava demonstrar.

A.3 Lei de expoentes para integração fracionária

Usando a definição da Equação (2.31):

$${}_a I_x^\alpha [{}_a I_x^\beta [f(x)]] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x - y)^{\alpha-1} \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^y (y - t)^{\beta-1} f(t) dt dy \quad (\text{A.4})$$

Desde que a integral dupla da Equação (A.4) é imprópria, não é possível simplesmente inverter a ordem de integração sem considerar limitações. A garantia de integrabilidade está na **Fórmula de Dirichlet** (MILLER; ROSS, 1993):

$$\begin{aligned} & \int_a^x (x-y)^{\mu-1} \int_a^y (t-a)^{\lambda-1} (y-t)^{\nu-1} F(y,t) dt dy \\ &= \int_a^x (t-a)^{\lambda-1} \int_t^x (x-y)^{\mu-1} (y-t)^{\nu-1} F(y,t) dy dt, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

com μ, ν e λ reais positivos. Fazendo $\lambda = 1$, $\mu = \alpha$, $\nu = \beta$ e $F(y,t) = f(t)$, a Equação (A.4) se torna:

$${}_a I_x^\alpha [{}_a I_x^\beta [f(x)]] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^x f(t) \int_t^x (x-y)^{\alpha-1} (y-t)^{\beta-1} dy dt.$$

Fazendo a transformação $u = \frac{y-t}{x-t}$, os limites de integração em y mudam, com $y = t \rightarrow u = 0$ e $y = x \rightarrow u = 1$. Além disso, $dy = (x-t) du$, $(y-t)^{\beta-1} = (x-t)^{\beta-1} u^{\beta-1}$, $(x-y)^{\alpha-1} = (x-t)^{\alpha-1} (1-u)^{\alpha-1}$ e, logo:

$${}_a I_x^\alpha [{}_a I_x^\beta [f(x)]] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^x f(t) (x-t)^{\alpha+\beta-1} \int_0^1 (1-u)^{\alpha-1} u^{\beta-1} du dt. \quad (\text{A.6})$$

Na Equação (A.6), pode-se verificar a presença da função beta na integração em u , Equação (2.17). Dessa forma:

$${}_a I_x^\alpha [{}_a I_x^\beta [f(x)]] = \frac{1}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)} \int_a^x (x-t)^{\alpha+\beta-1} f(t) dt = {}_a I_x^{\alpha+\beta} [f(x)].$$

Assim, $\Gamma(\alpha)$ e $\Gamma(\beta)$ são cancelados, levando a:

$${}_a I_x^\alpha [{}_a I_x^\beta [f(x)]] = \frac{1}{\Gamma(\alpha+\beta)} \int_a^x (x-t)^{\alpha+\beta-1} f(t) dt$$

Portanto, seguindo novamente a definição, Equação (2.31):

$${}_a I_x^\alpha [{}_a I_x^\beta [f(x)]] = {}_a I_x^{\alpha+\beta} [f(x)],$$

como se queria demonstrar. A demonstração para ${}_x I_b^\alpha$ é análoga.

A.4 Fórmulas de integração por partes

A primeira fórmula de integração por partes a demonstrar é a Equação (2.44). Começando com o membro esquerdo e usando a definição de integral fracionária, Equação (2.31):

$$\int_a^b f(x) {}_a I_x^\alpha [g(x)] dx = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^b \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} f(x) g(t) dt dx.$$

O domínio dessa integração é $D = \{(x, t) \in \mathbb{R}^2 | a < x < b \text{ e } a < t < x\}$. Ele pode ser reescrito para inverter a integração, com $D = \{(x, t) \in \mathbb{R}^2 | a < t < b \text{ e } t < x < b\}$. Logo:

$$\int_a^b f(x) {}_a I_x^\alpha [g(x)] dx = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^b \int_t^b (x-t)^{\alpha-1} f(x) g(t) dx dt.$$

Logo, usando a definição da Equação (2.32) para a integral à direita:

$$\int_a^b f(x) {}_a I_x^\alpha [g(x)] dx = \int_a^b {}_t I_b^\alpha [f(t)] g(t) dt,$$

como se queria demonstrar.

Quanto à derivação fracionária, existem duas fórmulas de integração por partes para demonstrar. Partindo do membro esquerdo da Equação (2.91), pode-se usar a definição mostrada na Equação (2.45a) para:

$$\int_a^b f(x) {}_a D_x^\alpha [g(x)] dx = \int_a^b f(x) D^{[\alpha]+1} {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} [g(x)] dx \quad (\text{A.7})$$

Integrando por partes $[\alpha] + 1$ vezes:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) {}_a D_x^\alpha [g(x)] dx &= \sum_{j=0}^{[\alpha]} (-D)^j [f(x)] D^{[\alpha]-j} \left\{ {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} [g(x)] \right\} \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \int_a^b (-D)^{[\alpha]+1} [f(x)] {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} [g(x)] dx \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Para transportar a integração, pode-se usar a Equação (2.44) para obter:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) {}_a D_x^\alpha [g(x)] dx &= \sum_{j=0}^{[\alpha]} (-D)^j f(x) D^{[\alpha]-j} \left\{ {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} [g(x)] \right\} \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \int_a^b {}_x I_b^{[\alpha]-\alpha+1} (-D)^{[\alpha]+1} [f(x)] g(x) dx \\ &= \sum_{j=0}^{[\alpha]} (-D)^j f(x) D^{[\alpha]-j} \left\{ {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} [g(x)] \right\} \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \int_a^b {}_x^C D_b^\alpha [f(x)] g(x) dx, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

com o uso da Equação (2.64b) para destacar a derivada de Caputo à direita. As versões fracionárias do Teorema Fundamental do Cálculo, Equações (2.58a) e (2.58b), podem ser usadas para a contração de $D^{[\alpha]-j} \left\{ {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} [g(x)] \right\}$.

Partindo também de:

$$\int_a^b f(x) {}_a^C D_x^\alpha [g(x)] dx = ??$$

Escrevendo a derivação de Caputo a partir de seus operadores:

$$\int_a^b f(x) {}^C D_x^\alpha [g(x)] = \int_a^b f(x) {}_a I_x^{[\alpha]-\alpha+1} \{D^{[\alpha]+1}[g(x)]\} dx. \quad (\text{A.10})$$

Usando a Equação (2.44) para a integração por partes para integrais fracionárias:

$$\int_a^b f(x) {}^C D_x^\alpha [g(x)] = \int_a^b {}_x I_b^{[\alpha]-\alpha+1} [f(x)] D^{[\alpha]+1} [g(x)] dx. \quad (\text{A.11})$$

Portanto, usando a integração por partes usual $[\alpha] + 1$ vezes, chega-se a:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) {}^C D_x^\alpha [g(x)] &= \sum_{j=0}^{[\alpha]} (-D)^j \{ {}_x I_b^{[\alpha]-\alpha+1} [f(x)] \} D^{[\alpha]-j} [g(x)] \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \int_a^b (-D)^{[\alpha]+1} \{ {}_x I_b^{[\alpha]-\alpha+1} [f(x)] \} g(x) dx \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

É possível observar a definição da derivada de Riemann-Liouville à direita, Equação (2.45b), nessa equação. E também, usando as versões fracionárias dos Teorema Fundamental do Cálculo, Equações (2.58a) e (2.58b) para a contração de $(-D)^j \{ {}_x I_b^{[\alpha]-\alpha+1} [f(x)] \}$:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) {}^C D_x^\alpha [g(x)] dx &= {}_x I_b^{[\alpha]-\alpha+1} [f(x)] D^{[\alpha]} [g(x)] \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \sum_{j=1}^{[\alpha]} \{ {}_x D_b^{j-[\alpha]+\alpha-1} [f(x)] \} D^{[\alpha]-j} [g(x)] \Big|_{x=a}^b + \\ &+ \int_a^b {}_x D_b^\alpha [f(x)] g(x) dx. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

A.5 Propriedades de funções especiais

A função exponencial de Miller-Ross possui as seguintes propriedades (MILLER; ROSS, 1993):

$$E_t(0, m) = e^{mt}, \quad (\text{A.14a})$$

$$E_t(-p, m) = m^p E_t(0, m), \quad (\text{A.14b})$$

$$E_t(1, m) = \frac{E_t(0, m) - 1}{m}, \quad (\text{A.14c})$$

$$E_t(\nu, m) = m^p E_t(\nu + p, m) + \sum_{k=0}^{p-1} m^k \frac{t^{\nu+k}}{\Gamma(\nu + k + 1)}, \quad (\text{A.14d})$$

$$D^p E_t(\nu, m) = E_t(\nu - p, m), p \in \mathbb{N}, \quad (\text{A.14e})$$

$$\int_0^t x^w E_{t-x}(\nu, m) dx = \Gamma(w + 1) E_t(\nu + w + 1, m). \quad (\text{A.14f})$$

APÊNDICE B – Cálculo estatístico para as variáveis do banho térmico

B.1 Função partição

Da Equação (4.40) e utilizando $H_B = \sum_v h_v$, da Equação (4.41):

$$\exp(-\beta H_B) = \prod_{v=1}^N \exp(-\beta h_v). \quad (\text{B.1})$$

Logo, usando a Equação (4.39) para o banho térmico em $t = 0$:

$$\begin{aligned} Z &= \prod_{v=1}^N \int \exp(-\beta h_v) dq_{0,v} dq_{1,v} dp_{0,v} dp_{1,v} \\ &= \prod_{v=1}^N \int \int \int \int \exp \left(-\frac{\beta}{2m_v} (p_{1,v})^2 - \frac{1}{2} i \beta \gamma_v (q_{1,v})^2 - \beta q_{1,v} p_{0,v} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v} \right) dq_{0,v} dq_{1,v} dp_{0,v} dp_{1,v} \\ &= \prod_{v=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{\beta}{2m_v} p_{1,v}^2 \right) dp_{1,v} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v} \right) dq_{0,v} \\ &\quad \int \int \exp \left(-\frac{1}{2} i \beta \gamma_v q_{1,v}^2 - \beta q_{1,v} p_{0,v} \right) dq_{1,v} dp_{0,v}, \end{aligned}$$

reduzindo o problema ao cálculo de duas integrais simples e uma dupla. As quantidades $p_{1,v}$ e $q_{0,v}$ são reais, o que justifica os contornos de integração utilizados na função partição Z . Ainda (ARFKEN; WEBER, 2007):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(ay^2+by+c)} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{(b^2-4ac)/4a}. \quad (\text{B.2})$$

Logo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{\beta}{2m_v} p_{1,v}^2 \right) dp_{1,v} = \sqrt{\frac{2\pi m_v}{\beta}} \quad (\text{B.3a})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v} \right) dq_{0,v} = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m_v \omega_v^2}} \exp \left(\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2m_v \omega_v^2} \right) \quad (\text{B.3b})$$

Porém, para as variáveis $q_{1,v}$ e $p_{0,v}$, sua codependência pela relação $p_{0,v} = -i\gamma_v q_{1,v} - im_v q_{3,v}$ ($q_{3,v} = {}_a D_t^{1/2} \dot{q}_{0,v}$) não torna trivial a tarefa de determinar os contornos. Considerando que

$q_{1,v}$ e $q_{3,v}$ são reais e usando a transformação jacobiana:

$$dp_{0,v}dq_{1,v} = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ -i\gamma_v & -im_v \end{vmatrix} dq_{1,v}dq_{3,v} = -im_v dq_{1,v}dq_{3,v}.$$

Logo, integrando $q_{1,v}$ e $q_{3,v}$ no intervalo $(-\infty, \infty)$:

$$\begin{aligned} & \int \int \exp \left(-\frac{1}{2}i\beta\gamma_v q_{1,v}^2 - \beta q_{1,v}p_{0,v} \right) dq_{1,v}dp_{0,v} = \\ & \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{3\beta}{2}i\gamma_v q_{1,v}^2 - i\beta m_v q_{1,v}q_{3,v} \right) (-im_v) dq_{1,v}dq_{3,v} \\ & = (-im_v) \left(\frac{2\pi}{3\beta i\gamma_v} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(\frac{i\beta m_v^2 q_{3,v}^2}{6\gamma_v} \right) dq_{3,v} \\ & = (-im_v) \left(\frac{2\pi}{3\beta i\gamma_v} \right)^{1/2} \left(\frac{6\pi i\gamma_v}{\beta m_v^2} \right)^{1/2} = \frac{2\pi}{i\beta}. \end{aligned} \tag{B.3c}$$

Logo, a combinação das Equações (B.3a), (B.3b) e (B.3c) conduz a:

$$Z = \left(\frac{4\pi^2}{i\beta^2} \right)^N \prod_{v=1}^N \frac{1}{\omega_v} \exp \left(\frac{\beta\lambda^2\Gamma_v^2 Q_0^2}{2m_v\omega_v^2} \right). \tag{B.4}$$

B.2 Cálculo de $\langle q_{0,v} \rangle$

Usando a Equação (4.51):

$$\begin{aligned} \langle q_{0,v} \rangle &= \int q_{0,v} \rho \prod_{w=1}^N dp_{0,w} dp_{1,w} dq_{0,w} dq_{1,w} \\ &= \int q_{0,v} Z_v^{-1} \exp(-\beta h_v) dp_{0,v} dp_{1,v} dq_{0,v} dq_{1,v} \\ &= \frac{1}{Z_v} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{\beta}{2m_v} p_{1,v}^2 \right) dp_{1,v} \int_{-\infty}^{\infty} q_{0,v} \exp \left(-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v} \right) dq_{0,v} \\ & \quad \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{1}{2}i\beta\gamma_v q_{1,v}^2 - \beta q_{1,v}p_{0,v} \right) dp_{0,v} dq_{1,v} \end{aligned} \tag{B.5}$$

Da integração de $q_{0,v}$, primeiramente, completando o trinômio quadrado perfeito:

$$-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v} = -\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 + \frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2m_v \omega_v^2}.$$

Logo, procedendo para a integração de $q_{0,v}$:

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} q_{0,v} \exp \left(-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v} \right) dq_{0,v} \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} + \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right) \exp \left[-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \right] \exp \left(\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2 m_v \omega_v^2} \right) dq_{0,v} \\
 &= \exp \left(\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2 m_v \omega_v^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right) \exp \left[-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \right] dq_{0,v} + \\
 & \quad + \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \exp \left(\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2 m_v \omega_v^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \right] dq_{0,v}.
 \end{aligned}$$

A primeira integral da Equação (B.6) é simétrica em $(-\infty, \infty)$ se centrada em $q_{0,v} = \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2}$.

Por conta da substituição $u = q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2}$, o integrando se torna ímpar e o resultado é nulo. Para a segunda integral, usando a Equação (B.2):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \right] dq_{0,v} = \left(\frac{2\pi}{\beta m_v \omega_v^2} \right)^{1/2}. \quad (\text{B.7})$$

Portanto, na Equação (B.6):

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{\infty} q_{0,v} \exp \left(-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v} \right) dq_{0,v} = \\
 & \quad \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \left(\frac{2\pi}{\beta m_v \omega_v^2} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2 m_v \omega_v^2} \right).
 \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Logo, a combinação das Equações (B.3a), (B.3c) e (B.8) leva a:

$$\begin{aligned}
 \langle q_{0,v} \rangle &= Z_v^{-1} \left(\frac{2\pi m_v}{\beta} \right)^{1/2} \frac{2\pi}{i\beta} \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \left(\frac{2\pi}{\beta m_v \omega_v^2} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2 m_v \omega_v^2} \right) \\
 &= \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2}.
 \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

B.3 Cálculo de $\langle p_{1,v} \rangle$

Pela Equação (4.51):

$$\begin{aligned}
 \langle p_{1,v} \rangle &= \int p_{1,v} \rho \prod_{w=1}^N dp_{0,w} dp_{1,w} dq_{0,w} dq_{1,w} \\
 &= \frac{1}{Z_v} \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,v} \exp\left(-\frac{\beta}{2m_v} p_{1,v}^2\right) dp_{1,v} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda \Gamma_v Q q_{0,v}\right) dq_{0,v} \\
 &\quad \int \int \exp\left(-\frac{1}{2} i \beta \gamma_v q_{1,v}^2 - \beta q_{1,v} p_{0,v}\right) dq_{1,v} dp_{0,v}.
 \end{aligned}$$

Porém, o integrando em $p_{1,v}$ é ímpar e a integração é simétrica, no intervalo $(-\infty, \infty)$. Logo:

$$\langle p_{1,v} \rangle = 0. \quad (\text{B.10})$$

B.4 Cálculo de $\langle q_{0,v}^2 \rangle$

Aplicando novamente a Equação (4.51):

$$\begin{aligned}
 \langle q_{0,v}^2 \rangle &= \int q_{0,v}^2 \rho \prod_{w=1}^N dq_{0,w} dq_{1,w} dp_{0,w} dp_{1,w} \\
 &= \frac{1}{Z_v} \int q_{0,v}^2 \exp(-\beta h_v) dq_{0,v} dq_{1,v} dp_{0,v} dp_{1,v} \\
 &= \frac{\beta \omega_v}{2\pi} \left(\frac{2\pi m_v}{\beta}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2m_v \omega_v^2}\right) \\
 &\quad \int_{-\infty}^{\infty} q_{0,v}^2 \exp\left(-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda \Gamma_v Q_0 q_{0,v}\right) dq_{0,v}.
 \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Deve-se preparar essa integral em termos do argumento $\left(-\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2m_v \omega_v^2}\right)$ para facilitar as operações. Então, completando o trinômio quadrado perfeito para o primeiro integrando:

$$\begin{aligned}
\langle q_{0,v}^2 \rangle &= \frac{\beta\omega_v}{2\pi} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \exp \left[-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \right] dq_{0,v} + \right. \\
&\quad + \frac{2\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \int_{-\infty}^{\infty} q_{0,v} \exp \left[-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \right] dq_{0,v} - \\
&\quad \left. - \frac{\lambda^2 Q_0^2 \Gamma_v^2}{m_v^2 \omega_v^4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \right] dq_{0,v} \right\}.
\end{aligned} \tag{B.12}$$

Sabe-se que (ARFKEN; WEBER, 2007):

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2s} \exp(-ax^2) dx = \frac{(2s-1)(2s-3)\dots 1}{2^s a^s} \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \tag{B.13}$$

Logo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \exp \left[-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 \left(q_{0,v} - \frac{\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \right)^2 \right] dq_{0,v} = \frac{1}{\beta m_v \omega_v^2} \left(\frac{2\pi}{\beta m_v \omega_v^2} \right)^{1/2}, \tag{B.14}$$

e o cálculo de $\langle q_{0,v}^2 \rangle$ pode ser finalizado pela substituição das Equações (B.3b), (B.8) e (B.14) em (B.12):

$$\begin{aligned}
\langle q_{0,v}^2 \rangle &= \frac{\beta\omega_v}{2\pi} \left(\frac{2\pi m_v}{\beta} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{\beta m_v \omega_v^2} \left(\frac{2\pi}{\beta m_v \omega_v^2} \right)^{1/2} + \frac{2\lambda Q_0 \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \cdot \frac{\lambda \Gamma_v Q_0}{m_v \omega_v^2} \cdot \left(\frac{2\pi}{\beta m_v \omega_v^2} \right)^{1/2} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{\lambda^2 Q_0^2 \Gamma_v^2}{m_v^2 \omega_v^4} \left(\frac{2\pi}{\beta m_v \omega_v^2} \right)^{1/2} \right] \\
&= \frac{1}{\beta m_v \omega_v^2} + \frac{\lambda^2 Q_0^2 \Gamma_v^2}{m_v^2 \omega_v^4}.
\end{aligned} \tag{B.15}$$

B.5 Cálculo de $\langle p_{1,v}^2 \rangle$

Levando em conta a Equação (B.13):

$$\int_{-\infty}^{\infty} p_{1,v}^2 \exp \left(-\frac{\beta}{2m_v} p_{1,v}^2 \right) dp_{1,v} = \frac{m_v}{\beta} \left(\frac{2\pi m_v}{\beta} \right)^{1/2}, \tag{B.16}$$

o cálculo de $\langle p_{1,v}^2 \rangle$ conduz a:

$$\begin{aligned}
\langle p_{1,v}^2 \rangle &= \int p_{1,v}^2 \rho \prod_{w=1}^N dq_{0,w} dq_{1,w} dp_{0,w} dp_{1,w} \\
&= \frac{1}{Z_v} \int_{-\infty}^{\infty} p_{1,v}^2 \exp\left(-\frac{\beta}{2m_v} p_{1,v}^2\right) dp_{1,v} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\beta}{2} m_v \omega_v^2 q_{0,v}^2 + \beta \lambda Q_0 \Gamma_v q_{0,v}\right) dq_{0,v} \\
&\quad \int \int \exp\left(-\frac{1}{2} i \beta \gamma_v q_{1,v}^2 - \beta q_{1,v} p_{0,v}\right) dq_{1,v} dp_{0,v} \\
&= \frac{i \beta^2 \omega_v}{4 \pi^2} \exp\left(-\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2 m_v \omega_v^2}\right) \frac{m_v}{\beta} \left(\frac{2 \pi m_v}{\beta}\right)^{1/2} \left(\frac{2 \pi}{\beta m_v \omega_v^2}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{\beta \lambda^2 \Gamma_v^2 Q_0^2}{2 m_v \omega_v^2}\right) \frac{2 \pi}{i \beta} \\
&= \frac{m_v}{\beta}.
\end{aligned} \tag{B.17}$$

B.6 Cálculo de $\langle F(t) \rangle$

Levando em consideração os resultados das Equações (4.53) e (4.54) na Equação (4.71):

$$\begin{aligned}
\langle F(t) \rangle &= \sum_v \Gamma_v \left\{ \left[\langle q_{0,v} \rangle - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh(\Omega_v t) + \right. \\
&\quad \left. \left[\frac{\langle p_{1,v} \rangle}{m_v \Omega_v} + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \langle q_{0,v} \rangle - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh(\Omega_v t) \right\} \\
&= \sum_v \Gamma_v \left\{ \left[\frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \cosh(\Omega_v t) + \right. \\
&\quad \left. + \left[\frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \cdot \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 \right] e^{-(\gamma_v/2m_v)t} \sinh(\Omega_v t) \right\} = 0
\end{aligned} \tag{B.18}$$

B.7 Cálculo de $\langle F_1 \rangle$, $\langle F_2 \rangle$, $\langle F_3 \rangle$ e $\langle F_4 \rangle$

Deve-se recordar que, com $\langle p_{1,v} \rangle = 0$, as quantidades $\langle p_{1,u} q_{0,v} \rangle$ e $\langle p_{1,v} q_{0,u} \rangle$ se anulam, pois $\langle p_{1,u} q_{0,v} \rangle = \langle p_{1,u} \rangle \langle q_{0,v} \rangle$ por conta da Equação (4.52), para $u \neq v$, e por conta da integral em $p_{1,v}$ ser ímpar e simétrica, para $u = v$. De modo semelhante, para $u \neq v$, $\langle p_{1,u} p_{1,v} \rangle = 0$. Para $u = v$, recupera-se o resultado da Equação (4.55). Para $u \neq v$, $\langle q_{0,u} q_{0,v} \rangle = \langle q_{0,u} \rangle \langle q_{0,v} \rangle$ por conta da Equação (4.52).

Logo, de forma compacta:

$$\langle q_{0,u}q_{0,v} \rangle = \frac{\lambda^2 Q_0^2 \Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} + \delta_{uv} \frac{1}{\beta m_v \omega_v^2} \quad (\text{B.19})$$

e

$$\langle p_{1,u}p_{1,v} \rangle = \delta_{uv} \frac{m_v}{\beta}, \quad (\text{B.20})$$

recordando da Equação (4.56).

Com isso, é possível determinar $\langle F_1 \rangle$, $\langle F_2 \rangle$, $\langle F_3 \rangle$ e $\langle F_4 \rangle$ da Equação (4.72). Para $\langle F_1 \rangle$, partindo da Equação (4.73a):

$$\begin{aligned} \langle F_1 \rangle &= \langle q_{0,u}q_{0,v} \rangle - \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} Q_0 \langle q_{0,v} \rangle - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \langle q_{0,u} \rangle + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} Q_0^2 \\ &= \frac{\lambda^2 Q_0^2 \Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} + \delta_{uv} \frac{1}{\beta m_v \omega_v^2} - \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} Q_0 \cdot \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \\ &\quad - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \cdot \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} Q_0 + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} Q_0^2 \\ &= \delta_{uv} \frac{1}{\beta m_v \omega_v^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Para $\langle F_2 \rangle$, partindo da Equação (4.73b):

$$\begin{aligned} \langle F_2 \rangle &= \frac{1}{m_v \Omega_v} \langle q_{0,u}p_{1,v} \rangle + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \langle q_{0,u}q_{0,v} \rangle - \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0 \langle q_{0,u} \rangle - \\ &\quad - \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} \left(\frac{2\langle p_{1,v} \rangle + \gamma_v \langle q_{0,v} \rangle}{2m_v \Omega_v} \right) Q_0 + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v \gamma_v}{2m_u m_v^2 \omega_u^2 \omega_v^2 \Omega_v} Q_0^2 \\ &= \frac{1}{m_v \Omega_v} \cdot 0 + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \left(\frac{\delta_{uv}}{\beta m_v \omega_v^2} + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} Q_0^2 \right) - \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \cdot \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \cdot \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} Q_0 - \\ &\quad - \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} Q_0 \left(\frac{1}{m_v \Omega_v} \cdot 0 + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \cdot \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \right) + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \cdot \frac{\Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} Q_0^2 \\ &= \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \frac{\delta_{uv}}{\beta m_v \omega_v^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Para $\langle F_3 \rangle$, da Equação (4.73c):

$$\begin{aligned}
\langle F_3 \rangle &= \frac{1}{m_u \Omega_u} \langle p_{1,u} q_{0,v} \rangle + \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \langle q_{0,u} q_{0,v} \rangle - \frac{\lambda \Gamma_u \gamma_u}{2m_u^2 \omega_u^2 \Omega_u} \langle q_{0,v} \rangle Q_0 - \\
&\quad - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} \left(\frac{2\langle p_{1,u} \rangle + \gamma_u \langle q_{0,u} \rangle}{2m_u \Omega_u} \right) Q_0 + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v \gamma_u}{2m_v m_u^2 \omega_u^2 \omega_v^2 \Omega_u} Q_0^2 \\
&= \frac{1}{m_u \Omega_u} \cdot 0 + \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \left(\frac{\delta_{uv}}{\beta m_v \omega_v^2} + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} Q_0^2 \right) - \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \cdot \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} Q_0 \cdot \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 - \\
&\quad - \frac{\lambda \Gamma_v}{m_v \omega_v^2} Q_0 \left(\frac{1}{m_u \Omega_u} \cdot 0 + \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \cdot \frac{\lambda \Gamma_u}{m_u \omega_u^2} Q_0 \right) + \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \cdot \frac{\Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} Q_0^2 + \\
&= \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \frac{\delta_{uv}}{2m_v \omega_v^2}.
\end{aligned} \tag{B.23}$$

E para $\langle F_4 \rangle$, da Equação (4.73d):

$$\begin{aligned}
\langle F_4 \rangle &= \frac{1}{m_u m_v \Omega_u \Omega_v} \langle p_{1,u} p_{1,v} \rangle + \frac{1}{m_u \Omega_u} \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \langle p_{1,u} q_{0,v} \rangle - \\
&\quad - \frac{1}{m_u \Omega_u} \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} \langle p_{1,u} \rangle Q_0 + \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \frac{1}{m_v \Omega_v} \langle q_{0,u} p_{1,v} \rangle + \\
&\quad + \frac{\gamma_u \gamma_v}{4m_u m_v \Omega_u \Omega_v} \langle q_{0,u} q_{0,v} \rangle - \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \frac{\lambda \Gamma_v \gamma_v}{2m_v^2 \omega_v^2 \Omega_v} \langle q_{0,u} \rangle Q_0 + \\
&\quad + \frac{\lambda \Gamma_u \gamma_u}{2m_u^2 \omega_u^2 \Omega_u} \left(\frac{2\langle p_{1,v} \rangle + \gamma_v \langle q_{0,v} \rangle}{2m_v \Omega_v} \right) Q_0 - \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v \gamma_u \gamma_v}{4m_u^2 m_v^2 \omega_u^2 \omega_v^2 \Omega_u \Omega_v} Q_0^2 \\
&= \frac{m_v \delta_{uv}}{\beta m_u m_v \Omega_u \Omega_v} + \frac{\gamma_u \gamma_v}{4m_u m_v \Omega_u \Omega_v} \left(\frac{\delta_{uv}}{\beta m_v \omega_v^2} + \frac{\lambda^2 \Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} Q_0^2 \right) - \\
&\quad - \frac{\gamma_u \gamma_v}{4m_u m_v \Omega_u \Omega_v} \cdot \frac{\lambda \Gamma_v Q_0}{m_v \omega_v^2} \cdot \frac{\lambda \Gamma_u Q_0}{m_u \omega_u^2} + \frac{\gamma_u}{2m_u \Omega_u} \cdot \frac{\lambda \Gamma_u Q_0}{m_u \omega_u^2} \left(\frac{1}{m_v \Omega_v} \cdot 0 + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\gamma_v}{2m_v \Omega_v} \cdot \frac{\lambda \Gamma_v Q_0}{m_v \omega_v^2} \right) - \frac{\gamma_u \gamma_v}{4m_u m_v \Omega_u \Omega_v} \cdot \frac{\lambda^2 Q_0^2 \Gamma_u \Gamma_v}{m_u m_v \omega_u^2 \omega_v^2} \\
&= \frac{m_v \delta_{uv}}{\beta} \frac{1}{m_u m_v \Omega_u \Omega_v} + \frac{\gamma_u \gamma_v}{4m_u m_v \Omega_u \Omega_v} \frac{\delta_{uv}}{\beta m_v \omega_v^2}.
\end{aligned} \tag{B.24}$$

Referências

AGRAWAL, O. P. Formulation of euler-lagrange equations form fractional variational problems. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, v. 272, p. 368 – 379, 2002. Citado 5 vezes nas páginas 38, 43, 44, 51 e 61.

AGRAWAL, O. P. Generalized euler-lagrange equations and transversality conditions for fvps in terms of the caputo derivative. *Journal of Vibration and Control*, SAGE Publications, v. 13, n. 9 – 10, p. 1217 – 1237, 2007. Citado 4 vezes nas páginas 43, 50, 61 e 75.

AGRAWAL, O. P. Generalized variational problems and euler-lagrange equations. *Computers and Mathematics with Applications*, Elsevier, v. 59, p. 1852 – 1864, 2010. Citado na página 39.

ANDRADE, A. M. F. de; LIMA, E. G. de; DARTORA, C. A. Uma introdução ao cálculo fracionário e suas aplicações em circuitos elétricos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 40, n. 3, 2018. Citado na página 18.

ARFKEN, G. B.; WEBER, H. *Física Matemática: métodos matemáticos para engenharia e física*. 6. ed. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007. Citado 7 vezes nas páginas 12, 13, 14, 15, 16, 82 e 86.

BALEANU, D.; AGRAWAL, O. P. Fractional hamiltonian formalism within caputo's derivative. *Czechoslovak Journal of Physics*, v. 56, n. 10/11, 2006. Citado na página 51.

CORTÉS, E.; WEST, B. J.; LINDENBERG, K. On the generalized langevin equation: Classical and quantum mechanical. *The Journal of Chemical Physics*, v. 82, p. 2708, 1985. Citado 3 vezes nas páginas 58, 59 e 65.

ENGHETA, N. Use of fractional integration to propose some "fractional"solutions for the scalar helmholtz equation. *Progress In Electromagnetics Research*, v. 12, p. 107–132, 1996. Citado na página 10.

ENGHETA, N. On the role of fractional calculus in electromagnetic theory. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, v. 39, n. 4, p. 35–46, 1997. Citado na página 10.

ENGHETA, N. Fractional curl operator in electromagnetics. *Microwave and Optical Technology Letters*, v. 17, n. 2, p. 86–91, 1998. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/28SICI291098-2760281998020529173A23C863A3AAID-MOP43E3.0.CO3B2-E>>. Citado na página 10.

GOLDSTEIN, H.; POOLE, C. P.; SAFKO, J. L. *Classical Mechanics*. 3. ed. [S.l.]: Pearson, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 62.

KLIMEK, M. Fractional sequential mechanics - models with symmetric fractional derivative. *Czechoslovak Journal of Physics*, p. 1349–1354, 2001. Citado 3 vezes nas páginas 53, 54 e 55.

KLIMEK, M. Lagrangean and hamiltonian fractional sequential mechanics. *Czechoslovak Journal of Physics*, v. 52, n. 11, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 56 e 61.

KUBO, R. The fluctuation-dissipation theorem. *Reports on Progress in Physics*, IOPscience, v. 29, n. 1, 1966. Citado na página 59.

LASKIN, N. *Fractional Quantum Mechanics*. Cingapura: World Scientific, 2018. Citado na página 10.

MILLER, K. S.; ROSS, B. *An Introduction to the Fractional Calculus and Fractional Differential Equations*. Nova Iorque: John Wiley & Sons, Inc., 1993. Citado 14 vezes nas páginas 9, 10, 16, 17, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 28, 40, 79 e 81.

MUSLIH, S. I.; BALEANU, D. Hamiltonian formulation of systems with linear velocities within riemann-liouville fractional derivatives. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, n. 304, p. 599 – 606, 2005. Citado 5 vezes nas páginas 38, 43, 46, 47 e 48.

OLDHAM, K. B.; SPANIER, J. *The Fractional Calculus*. Nova Iorque: Academic Press, 1974. Citado na página 40.

PODLUBNY, I. *Fractional Differential Equations: An Introduction to Fractional Derivatives, Fractional Differential Equations, to Methods of Their Solution and Some of Their Applications*. 1st. ed. San Diego, CA: Academic Press, 1999. (Mathematics in science and engineering 198). ISBN 9780125588409,0125588402. Citado 11 vezes nas páginas 16, 18, 19, 20, 24, 25, 30, 31, 32, 34 e 37.

RIEWE, F. Nonconservative lagrangian and hamiltonian mechanics. *Physical Review E*, v. 53, n. 2, p. 1890 – 1899, 1996. Citado 7 vezes nas páginas 10, 38, 40, 41, 42, 43 e 46.

RIEWE, F. Mechanics with fractional derivatives. *Physical Review E*, v. 55, n. 3, p. 3581 – 3592, 1997. Citado 12 vezes nas páginas 38, 40, 41, 42, 44, 45, 46, 48, 50, 51, 52 e 61.

ZASLAVSKY, G. M. Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport. *Physics Reports*, Elsevier, v. 371, p. 461–580, 2002. Citado na página 10.

ZILL, D. G.; CULLEN, M. R. *Matemática Avançada para Engenharia*. Porto Alegre: Bookman, 2009. v. 1 – 3. Citado 2 vezes nas páginas 63 e 72.